



Universidad Nacional Mayor de San Marcos
Universidad del Perú. Decana de América

Dirección General de Estudios de Posgrado
Facultad de Ciencias Físicas
Unidad de Posgrado

**Estudio de la competición entre interacciones de
corto y largo alcance en el Modelo de Blume Capel
de espín 5/2**

TESIS

Para optar el Grado Académico de Magíster en Física con
mención en Física del Estado Sólido

AUTOR

Denis Américo MURILLO PARIONA

ASESOR

Justo Alcides ROJAS TAPIA

Lima, Perú

2019



Reconocimiento - No Comercial - Compartir Igual - Sin restricciones adicionales

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

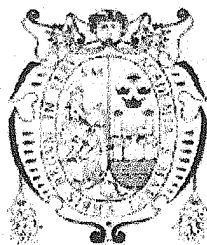
Usted puede distribuir, remezclar, retocar, y crear a partir del documento original de modo no comercial, siempre y cuando se dé crédito al autor del documento y se licencien las nuevas creaciones bajo las mismas condiciones. No se permite aplicar términos legales o medidas tecnológicas que restrinjan legalmente a otros a hacer cualquier cosa que permita esta licencia.

Referencia bibliográfica

Murillo, D. (2019). *Estudio de la competición entre interacciones de corto y largo alcance en el Modelo de Blume Capel de espín 5/2*. Tesis para optar el grado de Magíster en Física con mención en Física del Estado Sólido. Unidad de Posgrado, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú.

METADATA COMPLEMENTARIA

1. CODIGO ORCID DEL AUTOR: **NO APLICA**
2. CODIGO ORCID DEL ASESOR: **<https://orcid.org/0000-0002-9695-5746>**
3. DNI DEL AUTOR: 10605846
4. GRUPO DE INVESTIGACIÓN: **FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO**
5. INSTITUCIÓN QUE FINANCIA PARCIAL O TOTALMENTE LA INVESTIGACIÓN: **UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS**
6. UBICACIÓN GEOGRÁFICA DONDE SE DESARROLLO LA INVESTIGACIÓN: **UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS. Av. Germán Amezaga 375, Ciudad Universitaria, Lima, Perú. Latitud: -12,0590208°, Longitud: -77,0822407°**
7. AÑO O RANGO DE AÑOS QUE LA INVESTIGACIÓN ABARCO: **2015-2019**



UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
(Universidad del Perú, Decana de América)
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
Vicedecanato de Investigación y Posgrado

UNIDAD DE POSGRADO
"Año de la lucha contra la Corrupción y la Impunidad"

ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE MAGÍSTER EN FÍSICA CON MENCIÓN EN FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO

A los dieciocho días del mes de noviembre de 2019, siendo las seis de la tarde, se reunió el Jurado Examinador, en el auditorio 109 de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos, presidido por el señor Dr. Carlos Vladimir Landauro Sáenz como presidente, y con la asistencia de los siguientes miembros del Jurado Examinador:

Dr. Carlos Landauro Sáenz	(Presidente)
Dr. Jaime Francisco Vento Flores	(Miembro integrante)
Dr. Hugo Cabrera Tinoco	(Miembro integrante)
Dr. Chachi Rojas Ayala	(Miembro integrante)
Dr. Justo Alcides Rojas Tapia	(Asesor)

Para la sustentación oral y pública del trabajo de Tesis para optar el Grado Académico de Magíster en Física con mención en Física del Estado Sólido, del Bachiller **Murillo Pariona Denis Americo** con matrícula N° 15137025.

Después de darse lectura al expediente de Grado en el que consta haberse cumplido con todas las disposiciones reglamentarias, los señores Miembros del Jurado Examinador, atendieron a la exposición de la Tesis titulada:

**"Estudio de la competición entre interacciones de corto y largo alcance en el Modelo de Blume
Capel de espín 5/2"**

Y formuladas las preguntas, éstas fueron absueltas por el graduando.

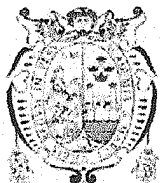
Acto seguido, en privado, el Jurado Examinador procedió a la calificación. El Presidente determinó el promedio de la calificación, obteniendo como resultado de:

Muy bueno (18) dieciocho

A continuación el Presidente del Jurado Examinador recomienda que la Facultad de Ciencias Físicas proponga que se le otorgue el Grado Académico de Magíster en Física con mención en Física del Estado Sólido al bachiller **Murillo Pariona Denis Americo**.

Siendo las *19:45h*, se levantó la sesión; recibiendo el graduando las felicitaciones de los señores Miembros del Jurado Examinador y público asistente.

Los Miembros del Jurado Examinador suscriben el Acta de sustentación de tesis en Lima, a los dieciocho días del mes de noviembre de 2019.



UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
(Universidad del Perú, Decana de América)
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
Vicedecanato de Investigación y Posgrado

UNIDAD DE POSGRADO
"Año de la lucha contra la Corrupción y la Impunidad"

Lima, 18 de noviembre de 2019

... Acta de sustentación de Tesis del Bach. Murillo Pariona Denis Americo....

251

Dr. Carlos Landauro Sáenz
Presidente

203

Dr. Jaime Francisco Vento Flores
Miembro integrante

Hugo Cabrera Tinoco

Dr. Hugo Cabrera Tinoco
Miembro integrante

Chachi Rojas Ayala

Dr. Chachi Rojas Ayala
Miembro Integrante

Justo Alcides Rojas Tapia

Dr. Justo Alcides Rojas Tapia
Asesor

Índice general

1. Introducción	11
2. Fundamento Teórico	14
2.1. Modelo de Heisenberg y Anisotropía Magnética	14
2.1.1. Ferromagnetismo	14
2.1.2. Campo cristalino y Anisotropía Magnética	22
2.1.3. Modelaje del Paramagnetismo	24
2.2. Transiciones de fase	29
2.3. Teoría de Landau	32
2.4. Modelo de Ising	34
2.4.1. Introducción	34
2.4.2. Tratamiento del modelo de Ising en 1D usando la matriz de transferencia	35
2.4.3. Imposibilidad de ordenamiento espontáneo en 1D	38
2.4.4. Modelo de Ising	40
2.4.5. Aproximación de Campo Medio para el Modelo de Ising . . .	41
2.5. Modelo Blume Capel de espín 5/2 con interacciones competitivas . .	49
3. Resultados y discusión	54
3.1. Temperatura crítica para $K = 0$	60
3.2. Diagrama de fases para el sistema	63
3.2.1. Diagrama de Fase para $K/J = 0$	64
3.2.2. Diagramas de Fase para $K/J > 0$	67
3.3. Conclusiones	82
A. Método potencia para calcular el maximo autovalor	84
B. Aproximación Hubbard Stratonovich para el modelo de Ising	85
C. Aproximación punto de silla	86
D. Calculo de la magnetización para el modelo Blume-Capel con espín 5/2 con la Aproximación de Campo Medio	88

Índice de figuras

2.1. Representación de la geometría de una molécula de H_2 . Los puntos grandes representan los protones y los puntos pequeños representan a los dos electrones. Las distancias entre los diferentes pares de partículas son representados por r_{ij} , con $i, j = a, b, 1, 2$	15
2.2. Ejemplo de campo cristalino de anisotropía con simetría en torno al eje z. Aquí tenemos seis cargas q a distancias a y b del origen.	23
2.3. Ejemplo gráfico de una transición de fase de primer orden.	31
2.4. Ejemplo gráfico de una transición de fase de segundo orden.	31
2.5. Diagrama de fases del agua.	32
2.6. La fig. a) muestra una red cuadrada con un solo dominio ferromagnético y la fig. b) muestra una red cuadrada con dos dominios ferromagnéticos.	39
2.7. Espín S_i con dos vecinos.	40
2.8. Espín S_i con cuatro vecinos.	40
2.9. Espín S_i con seis vecinos.	41
2.10. Gráfica de la variación del promedio térmico de S_i versus T	42
2.11. Sistema de espines de dimensión infinita.	47
2.12. Gráfica Magnetización versus tiempo(pasos Montecarlo). Aquí se muestra la variación del promedio térmico de S_i para valores alejados de T_C	48
2.13. Gráfica Magnetización versus tiempo(pasos Montecarlo). Aquí se muestra la variación del promedio térmico de S_i para valores próximos a T_C	49
3.1. Configuración de espines en $T = 0$ que minimizan el Hamiltoniano del sistema.	55
3.2. Gráfica energía versus K para $D = 0.1$ y $T = 0$	57
3.3. Gráfica energía versus K para $D = 0.25$ y $T = 0$ donde se muestra la existencia de un punto multicrítico.	58
3.4. Gráfica energía versus K para $D = 0.5$ y $T = 0$	58
3.5. Gráfica del diagrama de fases para el modelo a $T = 0$. El triangulo representa el punto multicrítico.	59
3.6. Gráfica densidad de energía(e) versus K para $D = 0.45$ y $T = 0$ donde se observa transiciones de fase de primer orden. Para este valor particular de D no existen otras fases mas que las presentadas	60
3.7. Gráfica de la magnetización versus temperatura para valores de $K/J = 0$ y $D/J = 0$	62

3.8.	Gráfica del diagrama de fase para K/J que varía. Las líneas de color rojo representan transiciones de segundo orden y las de color azul representan transiciones de primer orden. Los puntos negros en las curvas representan puntos tricríticos que marcan el cambio de una frontera de segundo orden a una de primer orden.	63
3.9.	Gráfica del diagrama de fase para $K/J = 0$. La curva de color negro representa fronteras de segundo orden y las líneas de color gris representan fronteras de primer orden. Aquí se observa que para $K/J = 0$ solo existen las fases $F1$, $F2$, $F3$ y la fase paramagnética P . Los asteriscos muestran el fin de las fronteras. En la parte superior de la gráfica se observa el ordenamiento respectivo para cada fase.	64
3.10.	Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para los valores de $K/J = 0$ y $D/J = 0.492$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0$ donde la línea vertical muestra un punto de una frontera de segundo orden que se está observando.	65
3.11.	Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para los valores de $K/J = 0$ y $D/J = 0.497$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0$ donde la línea vertical muestra dos puntos de frontera, uno de primer orden y el otro de segundo orden que se están observando.	65
3.12.	Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para los valores de $K/J = 0$ y $D/J = 0.4999$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0$ donde la línea vertical muestra tres puntos de frontera, uno de segundo orden y dos de primer orden que se están observando.	66
3.13.	Gráfica de densidad de energía libre versus m . Vemos que para estos valores de K/J , D/J y $K_B T/J$, la energía libre es igualmente minimizada por varias fases, lo cual muestra una coexistencia de las mismas. El punto negro en la gráfica superior derecha localiza el punto multicrítico donde coexisten estas fases (en el diagrama de fases respectivo).	67
3.14.	Gráfica del diagrama de fase para $K/J = 0.24$. Todas las fronteras son de primer orden. En la parte superior de la gráfica se observa el ordenamiento respectivo de cada fase.	68
3.15.	Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para $D/J = 0.249$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.24$ donde la línea vertical muestra un punto de una frontera de primer orden que se está observando.	69
3.16.	Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para $D/J = 0.254$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.24$ donde la línea vertical muestra dos puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	69
3.17.	Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para $D/J = 0.258$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.24$ donde la línea vertical muestra tres puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	70

3.18. Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para $D/J = 0.2585$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.24$ donde la línea vertical muestra cuatro puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	70
3.19. Gráfica de energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_3 y la fase paramagnética P para el valor de $K/J = 0.24$. En la parte superior derecha se muestra la parte del diagrama de fases que se está observando indicándose este con un punto negro.	71
3.20. Gráfica de energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_1 , F_2 y F_4 para el valor de $K/J = 0.24$. Aquí esta representado un punto multicrítico. En la parte superior derecha se muestra la parte del diagrama de fases que se está observando indicándose este con un punto negro.	72
3.21. Gráfica energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_1 y F_4 para el valor de $K/J = 0.24$. En la parte superior derecha se muestra la parte del diagrama de fases que se está observando indicándose este con un punto negro.	72
3.22. Gráfica del diagrama de fases para $K/J = 0.249$. Todas las fronteras son de primer orden. En la parte superior de la gráfica se observa el ordenamiento respectivo para cada fase.	73
3.23. Gráfica magnetización versus $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y $D/J = 0.252$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ donde la línea vertical muestra un punto de una frontera de primer orden que se está observando.	74
3.24. Gráfica magnetización versus $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y $D/J = 0.246$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ donde la línea vertical muestra dos puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	74
3.25. Gráfica magnetización versus $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y $D/J = 0.2493$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ donde la línea vertical muestra tres puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	75
3.26. Gráfica magnetización versus $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y $D/J = 0.250$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ donde la línea vertical muestra cuatro puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	75
3.27. Gráfica magnetización versus $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y $D/J = 0.2506$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ donde la línea vertical muestra cinco puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	76
3.28. Gráfica energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_2 , F_6 y la fase paramagnética P para el valor de $K/J = 0.249$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ indicándose con un punto negro la parte del diagrama que se está observando.	77

3.29. Gráfica energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_4 , F_2 y la fase paramagnética P para el valor de $K/J = 0.249$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ indicándose con un punto negro la parte del diagrama que se está observando.	77
3.30. Gráfica energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_2 y la fase paramagnética P para el valor de $K/J = 0.249$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ indicándose con un punto negro la parte del diagrama que se está observando.	78
3.31. Gráfica del diagrama de fase para $K/J = 0.2499$. Todas las fronteras son de primer orden. En la parte superior de la gráfica se observa el ordenamiento respectivo para cada fase.	79
3.32. Gráfica magnetización versus D/J para $K/J = 0.2499$ y $K_B T/J = 0.045$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$ donde la línea horizontal muestra un punto de una frontera de primer orden que se está observando.	80
3.33. Gráfica magnetización versus D/J para $K/J = 0.2499$ y $K_B T/J = 0.04$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$ donde la línea horizontal muestra dos puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	80
3.34. Gráfica magnetización versus D/J para $K/J = 0.2499$ y $K_B T/J = 0.037$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$ donde la línea horizontal muestra tres puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	81
3.35. Gráfica magnetización versus D/J para $K/J = 0.2499$ y $K_B T/J = 0.034$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$ donde la línea horizontal muestra cuatro puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	81
3.36. Gráfica magnetización versus D/J para $K/J = 0.2499$ y $K_B T/J = 0.028$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$ donde la línea horizontal muestra cinco puntos de fronteras de primer orden que se están observando.	82

Agradecimientos

El presente trabajo esta dedicado a mi madre quien ha sido la persona que con sus consejos y ejemplos a inspirado y guiado mi vida y puedo decir que lo que soy ahora es gracias a lo que ella me ha enseñado. Debo agradecer en segundo lugar al Dc. Octavio Rodriguez Salmon quien ha colaborado tambien con el desarrollo del presente trabajo y en tercer lugar debo agradecer además al Dc. Justo Rojas Tapia que tambien que con su experiencia y consejos ha colaborado en la mejora de este trabajo.

Resumen

En Física Estadística, uno de los mayores desafíos es calcular la función de partición de un sistema de muchos cuerpos interactuantes. La primera aproximación consiste en reducir el problema de muchos cuerpos al problema de un solo cuerpo, esto se logra al considerar las interacciones que afectan a una partícula como un promedio sobre éstas. Puede ser demostrado que esta aproximación es equivalente a tener un sistema donde cada partícula interactúa con todas las otras con la misma intensidad J , estas interacciones son llamadas interacciones de tipo campo medio, de esta manera la función de partición puede ser fácilmente calculada. Sin embargo, en modelos magnéticos la aproximación de campo medio puede afectar la topología de los diagramas de fase que describen las fronteras que separan las diferentes fases magnéticas que pueden existir. Se ha demostrado que los resultados de la aproximación de campo medio son exactos cuando el sistema se encuentra en infinitas dimensiones. A veces pueden surgir fases o tipos de frontera en la aproximación de campo medio que en un determinado modelo no existen debajo de cierta dimensión llamada dimensión crítica superior. En el presente trabajo la física estadística del modelo de Blume Capel con espín $5/2$ es estudiada al introducir una competencia entre interacciones ferromagnéticas J de tipo campo medio con interacciones antiferromagnéticas K de corto alcance en una cadena lineal de N espines. El objetivo de este trabajo es observar cómo la topología de los diagramas de fase evoluciona a partir del comportamiento magnético en campo medio (correspondiente a altas dimensiones), al introducir interacciones antiferromagnéticas de corto alcance estas crean un conflicto entre ferromagnetismo de altas dimensiones con antiferromagnetismo de bajas dimensiones. Los cálculos se han realizado tomando el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$). Para el desarrollo de la presente investigación se estudió el caso particular de $S = 5/2$ basado en el progreso de trabajos anteriores con $S = 1$ y $S = 3/2$ y mediante un procedimiento de minimización de energía libre basado en la construcción de un algoritmo en lenguaje C que busca el valor de la magnetización que minimiza la energía libre con la finalidad de conseguir cada punto relevante del diagrama de fase. Por lo tanto, los diagramas de fase fueron obtenidos al encontrar el parámetro de orden correspondiente al equilibrio en el plano $T - D$ para diferentes valores de K , donde T es la temperatura y D la constante de anisotropía del modelo de Blume Capel. En temperatura nula, el diagrama de fase fue hecho en plano D versus K minimizando la energía del Hamiltoniano. La magnetización es el parámetro de orden ferromagnético, mientras que el parámetro de orden antiferromagnético es una función de las magnetizaciones de las subredes que se forman. Cabe resaltar que el diagrama de fase a temperatura nula es fundamental para entender los diagramas de fase en temperatura finita. En $T = 0$, el diagrama se divide esencialmente en dos tipos de fases, fases ferromagnéticas para $K/J < 0.25$ y fases antiferromagnéticas para $K/J > 0.25$, estas últimas solo existen en $T = 0$,

debido a que son producidas por interacciones unidimensionales. Por otro lado, en temperatura finita, a medida que aumenta el valor de K surgen topologías complejas debido al surgimiento de más fronteras que limitan nuevas fases que van apareciendo de regiones pequeñas en el diagrama a temperatura nula. Para $K/J > 0.25$ todo orden magnético desaparece en $T > 0$, existiendo solo la fase paramagnética. Es importante resaltar que toda frontera de segundo orden desaparece para cierto valor de $K = K^*$, tal que $K^*/J < 0.25$. Por lo tanto, para $K^*/J < K/J < 0.25$, todas las fronteras que limitan las fases ferromagnéticas son de primer orden. Se encontró, además, un comportamiento anómalo de la magnetización para ciertas regiones del diagrama de fases, donde la magnetización aumenta con la temperatura. Los resultados de esta tesis contribuyeron parcialmente al artículo publicado en Phys. Lett. A 382, 3325 (2018), que fue un trabajo en colaboración con otro grupo de investigación.

Abstract

In Statistical Physics, one of the main challenges is to solve the many-body problem, which consists of treating the calculation of the partition function of N interacting particles. The first approximation consists of reducing the many-body problem to a one-body problem by considering all the interactions affecting each particle as a mean value. It can be shown that this is equivalent to have a system of N particles, where each one is interacting with all others with the same coupling constant J . These are called mean-field interactions. In this way the partition function can be easily calculated. However, in magnetic models with short-range interactions, the mean-field approach can affect the topology of the phase diagrams describing frontiers that separate the different magnetic phases that can exist. It has been shown that the results of the mean-field approach are exact when the system with short-range interactions is in infinite dimensions. Sometimes there are phases or some kinds of frontiers arising in the mean-field approach that does not exist in the model below a certain dimension called the upper critical dimension. In the present work the statistical physics of the Spin-5/2 Blume Capel model is studied with a competition between mean-field ferromagnetic interactions J and short-range antiferromagnetic interactions K in a linear chain of N spins. The aim of this work is to observe how the topology of the phase diagrams evolves from the mean-field approach (high-dimensional behavior), by introducing short-range antiferromagnetic interactions, which create a conflict between high-dimensional ferromagnetism and low-dimensional antiferromagnetism. The calculations were performed by taking the thermodynamic limit ($N \rightarrow \infty$). The spin $S = 5/2$ was chosen in order to improve past works published with $S = 1$, and $S = 3/2$. The phase diagrams were obtained by finding the values of the corresponding order parameter in the $T - D$ plane for different values of K , where T is the temperature, and D is the anisotropy constant of the Blume Capel model. The zero-temperature phase diagram was obtained in the $D - K$ plane by minimizing the energy of the Hamiltonian. For $T > 0$, every point of the phase diagram corresponds to an equilibrium point calculated by a minimization procedure of the free energy implemented in a C language code. The magnetization is the order parameter for measuring the ferromagnetic order, whereas the antiferromagnetic order parameter is a function of the magnetizations of the sublattices. It is important to mention that the zero-temperature phase diagram is the key to understand the behavior shown in the phase diagrams at finite temperatures. For $T = 0$, the phase diagrams is essentially divided into two regions, namely, a ferromagnetic region for $K/J < 0.25$, and an antiferromagnetic one for $K/J > 0.25$. The antiferromagnetic phases in this region only exist at $T = 0$ due to the fact that they are the product of one-dimensional interactions. On the other hand, for $T > 0$, the topology of the phase diagrams become more complex as K increases, by emerging frontiers enclosing some reduced phases from the zero-temperature phase diagram. For $K/J > 0.25$ all ferromagnetic phase disappears and only the pa-

ramagnetic phase exists. It is worth to highlight that all second-order frontiers become of first-order type above certain value of $K = K^*$, where $K^*/J < 0.25$. Thus, for $K^*/J < K/J < 0.25$ all frontiers are of first-order type. It was also found a magnetization anomaly for certain regions of the phase diagram, where the magnetization increases with the temperature. The results of this thesis contributed partially to the paper published in Phys. Lett. A 382, 3325 (2018), which was a work in collaboration with other group of researchers.

Capítulo 1

Introducción

Como se sabe el desarrollo de la tecnología está en la búsqueda continua de nuevos materiales, en particular, la búsqueda de nuevos materiales magnéticos está en continuo avance y sus técnicas son cada vez mejores debido al avance del modelado computarizado, por ejemplo, se puede investigar cómo interactúan los átomos y la energía que se requiere para que un compuesto permanezca estable. Recientemente se pudo predecir con precisión las propiedades de dos nuevos imanes, el primero el Co_2MnTi del cual se pudo encontrar que a 940 K el material perdería sus propiedades magnéticas y al ser sintetizado en laboratorio su temperatura fue de 938 K, lo cual puede ser muy útil para muchas aplicaciones comerciales. El segundo encontrado fue el Mn_2PtPd , un material antiferromagnético [1] que podría ser utilizado en discos duros para almacenamiento digital de información.

Gran parte de la información de las propiedades magnéticas de los materiales nos la da el conocimiento de sus diagramas de fase. Para obtener estos diagramas existen algunos métodos como los experimentales, entre ellos el de difracción de neutrones con el que se han realizado diversos trabajos [2, 3] y que justamente se vale de la difracción que sufren los neutrones cuando estos interactúan con los electrones desapareados en una muestra a estudiar que es irradiada con neutrones. También existen los métodos de simulación computacional como los métodos de Montecarlo, así como las técnicas analíticas. En este trabajo se utilizan métodos analíticos y numéricos para encontrar el equilibrio termodinámico a través de la minimización de la energía libre como se verá en secciones posteriores.

Un caso particular es el estudio de fenómenos competitivos entre interacciones de corto y largo alcance en un modelo pues los diagramas de fase que resultan muestran comportamientos magnéticos y fases muy interesantes. A continuación se mencionarán algunos estudios al respecto realizados en los últimos años.

Qimiao Si y Frank Steglisch[4] en la revista Science publicaron un artículo en el que se estudiaban las transiciones de fase en fermiones pesados¹ que se explicaban mediante la competencia de interacciones, dicho estudio mostró nuevas clases de puntos críticos cuánticos así como nuevas fases cuánticas brindando así más conocimiento acerca del tema. Recientemente se estudió experimentalmente una red de bosones[5] y se hizo que un gas cuántico estuviera atrapado en una red óptica dentro de una cavidad óptica fina. En el estudio se explicó lo observado usando un modelo de competencias entre interacciones de corto y largo alcance. Al estudiar los diagramas de fase se

¹Se les llama así a aquellos compuestos metálicos que tienen una capacidad calorífica electrónica de orden dos o tres mas grande que lo usual.

encontró la aparición de cuatro nuevas fases cuánticas, fase superfluido, fase de super-sólido, fase de aislante de Mott y una onda de densidad de carga. En un estudio del comportamiento de fluidos de baja densidad[6] se modeló un sistema competitivo con un potencial atractivo de corto alcance versus uno repulsivo de largo alcance con un potencial de tipo SALR², obteniéndose resultados interesantes como la coexistencia entre una fase de agrupación a bajas densidades y una fase de agrupación a altas densidades para ciertos valores de los parámetros del modelo, también con los resultados de este modelo se propuso un camino o forma de nucleación de cristales no clásica. Para modelar un cluster se planteó un sistema con competencias, una interacción atractiva de función potencial de Morse y una interacción repulsiva de tipo Yukawa[7]. De forma teórica se realizó un estudio de los patrones periódicos para un modelo de interacciones de corto y largo alcance, aquí se estudió un modelo donde la competencia se daba entre la tensión superficial y el potencial de Coulomb para una esfera tridimensional[8]. En un estudio de átomos en cavidades ópticas que implicaba el tratamiento de un sistema de muchos cuerpos en redes cuánticas se empleó un modelamiento de competición de corto y largo alcance[9].

Por los ejemplos mostrados se observa que el estudio de modelos competitivos es un tema de actualidad.

El modelo que se estudiará en el presente trabajo es una variante del modelo de Blume-Capel que se basa en los modelos de Ising. El modelo de Blume-Capel es un modelo de Ising con un término que involucra la anisotropía[10] esto es, el aporte del campo cristalino.

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + D \sum_i S_i^2 \quad (1.1)$$

Aquí se muestra el Hamiltoniano para un modelo Blume-Capel puro, donde S_i representa el valor que puede tomar el espín, el componente ferromagnético lo aporta el primer sumando donde J es el factor de interacción de intercambio y el segundo término es el componente de campo cristalino con parámetro de anisotropía D .

Capel estudio un modelo de Ising tomando en cuenta la anisotropía y la interacción ferromagnética a primeros vecinos para un campo magnético externo encontrando transiciones de fase de primer orden [11] Una generalización de este modelo “Blume-Emery Griffiths” fue propuesto para estudiar la transición λ^3 en mezclas ^4He - ^3He [12] así como su ordenamiento en mezclas binarias[13]. Los modelos que contienen el término de anisotropía llevan el nombre de modelos de Blume-Capel y son de amplio estudio, por ejemplo en el año 2018 un modelo de Blume-Capel sometido a un campo magnético aleatorio fue estudiado encontrándose diagramas de fase con una variedad de fenómenos multicríticos interesantes [14]. Estos modelos tienen una amplia variedad de aplicaciones que van desde, por ejemplo, el estudio de mezclas entre sólidos líquidos y gases[15][16] hasta el estudio del comportamiento crítico y multi-crítico

²El potencial SALR es un modelo de interacciones de soluto efectivas donde los grados de libertad están integrados.

³Una línea λ es una línea de frontera que divide la fase de fluido normal y la fase de superfluido en una mezcla de ^4He diluido en ^3He .

observado en los diagramas de fase[17, 18, 19, 20, 21, 22, 23] para el estudio de materiales ferromagnéticos. Por otro lado, Mehran Kardar planteó un modelo de Ising con competiciones entre interacciones antiferromagnéticas a primeros vecinos(corto alcance) e interacciones de largo alcance de tipo ferromagnético para vecinos equivalentes [24], esto último significa que cada espín interactúa con todos sus vecinos con la misma intensidad. Del mismo modo, Jhon Nagle publicó un modelo similar para una cadena lineal de Ising [25]. Estos modelos, tal como fueron planteados por Nagle y Kardar son conocidos como modelos Nagle-Kardar[26, 27] y son representados esencialmente por el siguiente Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} \quad (1.2)$$

El primer sumando representa el aporte ferromagnético, mientras que el segundo término representa el aporte antiferromagnético, siendo K la constante de interacción de los acoplamientos a primeros vecinos. En el presente trabajo se estudia un tipo de competición de interacciones como el del modelo Nagle-Kardar adaptado al modelo de Blume-Capel . En particular se estudia en esta tesis el caso $S = 5/2$, que significa que el espín podrá asumir sólo los valores $-5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2$. Cabe mencionar que el caso $S = 5/2$ no es algo de mero uso abstracto sino que es un caso de real aplicación, como se mostró en una publicación de la revista Nature[28] en el año 2014.

Siguiendo esta línea de estudio en la presente tesis se investiga el modelo de Blume-Capel con interacciones competitivas en una cadena lineal para el caso de $S = 5/2$ construyendo para su análisis las fronteras de primer y segundo orden que limitan las regiones del diagrama de fases. Con esta finalidad, el punto de partida es el siguiente Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + D \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (1.3)$$

donde $S_i = -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2$.

El primer término del Hamiltoniano contribuye al ordenamiento ferromagnético, donde la interacción J es entre todos los vecinos posibles. El segundo término favorece el ordenamiento antiferromagnético, aunque la interacción K es a primeros vecinos. El tercer sumando corresponde al término de anisotropía, que puede surgir por anisotropías en el campo cristalino, siendo D la constante de anisotropía.

Cabe mencionar, que los resultados obtenidos en esta tesis fueron ya publicados en una revista internacional [29].

Capítulo 2

Fundamento Teórico

2.1. Modelo de Heisenberg y Anisotropía Magnética

2.1.1. Ferromagnetismo

El ferromagnetismo es uno de los fenómenos más interesantes de la física del estado sólido y está presente en casi cualquier aspecto de nuestra vida. Como sabemos el magnetismo es la propiedad mediante la cual materiales cristalinos permanecen magnetizados sin la presencia de un campo magnético externo. A pesar de ser el primer fenómeno magnético en ser descubierto, aun hoy, hay aspectos del mismo que no se comprenden del todo.

El ferromagnetismo es un fenómeno cooperativo en el cual una fracción de espines se orientan en la misma dirección por debajo de cierta temperatura crítica T_c . Surge entonces la pregunta, ¿qué tipo de interacción es capaz de lograr un ordenamiento espontáneo de los momentos magnéticos? Es decir, un alineamiento de espines sin necesidad de aplicar un campo magnético externo que induzca a la magnetización. No podrían ser las “fuerzas de interacción entre dipolos permanentes” que dependen de la orientación relativa entre los dipolos y decaen con la distancia, pues sus valores de energía de interacción entre los dipolos atómicos son bastante pequeñas, del orden de $10^{-4}eV$ y que equivalen a una temperatura de un grado Kelvin lo cual es insuficiente para explicar el ordenamiento que se da, inclusive, a temperaturas superiores a la temperatura ambiente. Otra opción serían las energías electrostáticas entre electrones y iones, las que son suficientemente intensas como para explicar un ordenamiento a las temperaturas observadas. En 1930 Heisenberg, Dirac y otros científicos propusieron un modelo que combinaba la interacción electrostática de coulomb con el principio de exclusión de Pauli[30] que podía explicar el fenómeno del ferromagnetismo .

Interacción de intercambio y el modelo de Heisenberg

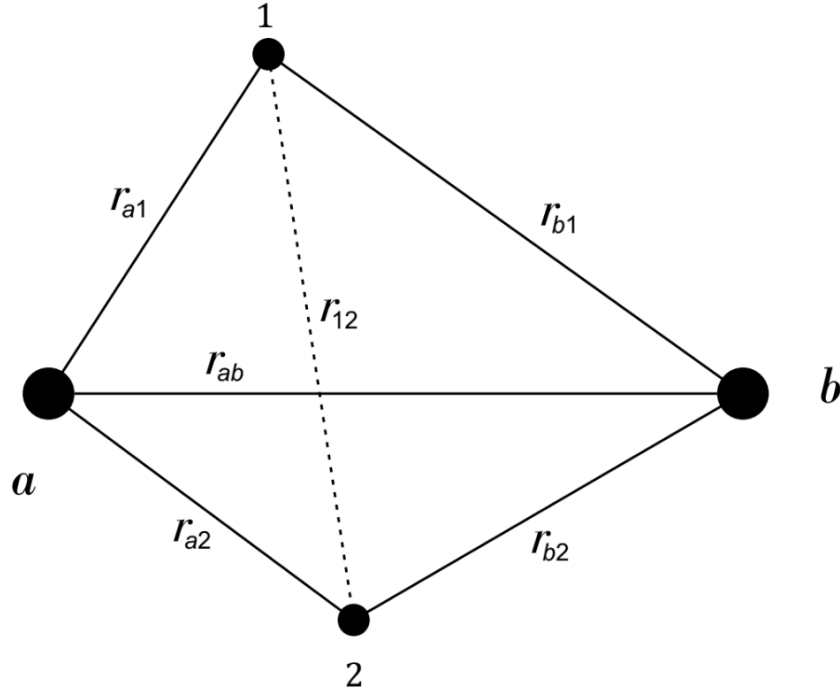


Figura 2.1: Representación de la geometría de una molécula de H_2 . Los puntos grandes representan los protones y los puntos pequeños representan a los dos electrones. Las distancias entre los diferentes pares de partículas son representados por r_{ij} , con $i, j = a, b, 1, 2$.

En esta sección se estudiará el primer término del Hamiltoniano propuesto para esta tesis y su relación con el modelo Heisenberg. Primero empezaremos analizando el término “ J ” que se denomina también interacción de intercambio.

Para entender el funcionamiento de esta combinación de fenómenos, consideremos el caso de dos electrones interactuantes en una molécula de hidrógeno(ver figura 2.1). De esta manera, consideremos las funciones de onda para dos electrones en un potencial que resulta de dos núcleos hidrogenoides ubicados a cierta distancia fija entre sí. Imaginemos a este sistema como un sólido formado por dos átomos con un electrón de valencia cada uno. Podemos decir que el Hamiltoniano de este sistema no depende del espín si despreciamos la interacción espín-orbita. Así, considerando la geometría del sistema podemos escribir el Hamiltoniano de la siguiente forma:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_1 + \hat{\mathcal{H}}_2 + \hat{W} + \hat{\mathcal{H}}_{LS} \quad (2.1)$$

donde:

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e_0^2}{r_{a1}} \quad (2.2)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_2^2 - \frac{e_0^2}{r_{b2}} \quad (2.3)$$

$$\hat{W} = \frac{e_0^2}{r_{ab}} + \frac{e_0^2}{r_{12}} - \frac{e_0^2}{r_{b1}} - \frac{e_0^2}{r_{a2}} \quad (2.4)$$

con $e_0 = e/(4\pi\epsilon_0)$ y los términos de $\hat{\mathcal{H}}_1$ y $\hat{\mathcal{H}}_2$ describen la situación cuando el átomo de hidrógeno está aislado. El operador \hat{W} describe la interacción entre los núcleos, electrones y así como entre los electrones y los núcleos. El último término representa la interacción espín-orbita. Para resolver este problema aplicamos la teoría de perturbaciones considerando al término \hat{W} como una pequeña perturbación. Entonces, primero se resuelve el problema no perturbado, esto es, el sistema de dos átomos de hidrógeno no interactuantes. Así es que debemos resolver la siguiente ecuación:

$$(\hat{\mathcal{H}}_1 + \hat{\mathcal{H}}_2)\Psi = U_0\Psi \quad (2.5)$$

Ahora se puede asumir una función de onda cuya solución se puede escribir de la siguiente manera: $\Psi = \varphi(r_1, r_2)\chi(s_1^z, s_2^z)$, donde χ es una función espín. Es importante resaltar que nuestro Hamiltoniano no depende explícitamente de la variable espín, así se puede resolver el problema solo como una función espacial y después del cálculo multiplicar el resultado por una función espín adecuada que cumpla el requisito de antisimetría de la función de onda total porque, siendo los electrones partículas fermiónicas, éstas deben cumplir el principio de exclusión de Pauli, que es garantizado cuando la función de onda total del sistema de fermiones es antisimétrica ante el intercambio de cualquier fermión.

Ahora, usando la teoría de perturbaciones podemos expresar la solución de la siguiente manera:

$$\varphi(r_1, r_2) = c_1\varphi_1(r_1, r_2) + c_2\varphi_2(r_1, r_2) \quad (2.6)$$

$$\varphi(r_1, r_2) = c_1\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) + c_2\phi_a(r_2)\phi_b(r_1) \quad (2.7)$$

que representa la combinación lineal de soluciones para cada átomo de hidrógeno aislado. Debemos tomar en cuenta que el valor para un átomo es $E_0 = -13,55eV$ y es evidente que para un sistema de dos átomos no interactuantes la energía será $2E_0$, es decir, que el sistema es doblemente degenerado.

Tenemos ahora la ecuación de Schrödinger de la siguiente manera:

$$(\hat{\mathcal{H}}_1 + \hat{\mathcal{H}}_2 + \hat{W})[c_1\varphi_1(r_1, r_2) + c_2\varphi_2(r_1, r_2)] = E[c_1\varphi_1(r_1, r_2) + c_2\varphi_2(r_1, r_2)] \quad (2.8)$$

A continuación se realizarán los cálculos para obtener los valores de las constantes c_1 y c_2 , para ello multiplicamos la ecuación primero por $\varphi_1^*(r_1, r_2)$ y luego por

$\varphi_2^*(r_1, r_2)$ e integrar sobre el espacio. Obtenemos entonces:

$$\begin{aligned}
& 2c_1E_0 + 2c_2E_0 \int \varphi_1^*(r_1, r_2)\varphi_2(r_1, r_2)dV_1dV_2 \\
& + c_1 \int \varphi_1^*(r_1, r_2)\hat{W}\varphi_1(r_1, r_2)dV_1dV_2 \\
& + c_2 \int \varphi_1^*(r_1, r_2)\hat{W}\varphi_2(r_1, r_2)dV_1dV_2 \\
& = c_1E + c_2E \int \varphi_1^*(r_1, r_2)\varphi_2(r_1, r_2)dV_1dV_2
\end{aligned} \tag{2.9}$$

$$\begin{aligned}
& 2c_2E_0 + 2c_1E_0 \int \varphi_2^*(r_1, r_2)\varphi_1(r_1, r_2)dV_1dV_2 \\
& + c_1 \int \varphi_2^*(r_1, r_2)\hat{W}\varphi_1(r_1, r_2)dV_1dV_2 \\
& + c_2 \int \varphi_2^*(r_1, r_2)\hat{W}\varphi_2(r_1, r_2)dV_1dV_2 \\
& = c_2E + c_1E \int \varphi_2^*(r_1, r_2)\varphi_1(r_1, r_2)dV_1dV_2
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Ahora vamos a expresar las expresiones anteriores introduciendo las cantidades S_0 , K y J .

La integral de superposición:

$$S_0 = \int \phi_a^*(r_i)\phi_b(r_2)dV_i \quad i = 1, 2 \tag{2.11}$$

La integral de Coulomb:

$$\begin{aligned}
K &= \int \varphi_1^*(r_1, r_2)\hat{W}\varphi_1(r_1, r_2)dV_1dV_2 \\
&= \int \varphi_2^*(r_1, r_2)\hat{W}\varphi_2(r_1, r_2)dV_1dV_2
\end{aligned} \tag{2.12}$$

La integral de intercambio:

$$\begin{aligned}
J &= \int \varphi_1^*(r_1, r_2)\hat{W}\varphi_2(r_1, r_2)dV_1dV_2 \\
&= \int \varphi_2^*(r_1, r_2)\hat{W}\varphi_1(r_1, r_2)dV_1dV_2
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Aplicando esta notación reescribimos las ecuaciones anteriores de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
c_1(2E_0 + K - E) + c_2(2E_0S_0^2 + J - ES_0^2) &= 0 \\
c_1(2E_0S_0^2 + J - ES_0^2) + c_2(2E_0 + K - E) &= 0
\end{aligned} \tag{2.14}$$

De aquí podemos encontrar dos posibles soluciones para la energía E y los coeficientes c_i , esto es:

$$E_t = 2E_0 + \frac{K - J}{1 - S_0^2}, c_1 = -c_2 \quad (2.15)$$

y

$$E_s = 2E_0 + \frac{K + J}{1 + S_0^2}, c_1 = c_2 \quad (2.16)$$

Con la condición de normalización de la función de onda total obtenemos:

$$1 = \int \varphi^*(r_1, r_2) \varphi(r_1, r_2) dV_1 dV_2 = 2|c_1|^2(1 \mp S_0^2) \quad (2.17)$$

o

$$c_1 = \frac{1}{2(1 \mp S_0^2)} \quad (2.18)$$

El signo - y + corresponden a las energías E_t y E_s , respectivamente. Podemos expresar entonces la función de onda orbital de la siguiente forma:

$$\varphi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1 - S_0^2)}} [\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) - \phi_a(r_2)\phi_b(r_1)] \quad (2.19)$$

que es antisimétrica y que corresponde al autovalor E_t y que cuando tomemos en cuenta la parte correspondiente al espín como veremos despues, correspondera al triplete.

$$\varphi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1 + S_0^2)}} [\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) + \phi_a(r_2)\phi_b(r_1)] \quad (2.20)$$

que es simétrica y que corresponde al autovalor E_s y que correspondera al singlete. Finalmente, ahora tomando en cuenta la funciones de espín y tomando en cuenta ademas la antisimetría de la función de onda total podemos construir las siguientes funciones que corresponderan al triplete y al singlete.

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2(1 - S_0^2)}} (\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) - \phi_a(r_2)\phi_b(r_1)) \xi_{\uparrow}(1) \xi_{\uparrow}(2), \quad S = 1, S^z = 1 \quad (2.21)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2(1 - S_0^2)}} (\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) - \phi_a(r_2)\phi_b(r_1)) \xi_{\downarrow}(1) \xi_{\downarrow}(2), \quad S = 1, S^z = 0 \quad (2.22)$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2(1-S_0^2)}}(\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) - \phi_a(r_2)\phi_b(r_1))$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|\xi_{\uparrow}(1)\xi_{\downarrow}(2) + \xi_{\downarrow}(1)\xi_{\uparrow}(2)|, \quad S = 1, S^z = -1 \quad (2.23)$$

y

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2(1+S_0^2)}}(\phi_a(r_1)\phi_b(r_2) + \phi_a(r_2)\phi_b(r_1))$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|\xi_{\uparrow}(1)\xi_{\uparrow}(2) - \xi_{\downarrow}(1)\xi_{\downarrow}(2)|, \quad S = 0, S^z = 0 \quad (2.24)$$

Como vemos, las tres primeras ecuaciones forman un triplete cuyo autovalor está representado por E_t , y la última es un singlete cuyo autovalor está representado por E_s . Ahora nos interesa calcular la diferencia de autovalores $\Delta = E_t - E_s = \frac{2(KS_0^2 - J)}{1 - S_0^2} \approx -2J$. Aquí hemos despreciado el término correspondiente a la integral de superposición pues es muy pequeño comparado con los otros términos en la expresión. Vemos que, si $J > 0$, el estado que predomina en el sistema es el correspondiente al triplete que corresponde a un sistema con espines paralelos(ferromagnético), y para un $J < 0$, el estado que predomina es el singlete con espines antiparalelos(antiferromagnético).

Ahora daremos atención a la parte de la función correspondiente al espín. Sean $|\psi_S\rangle$ e $|\psi_A\rangle$ funciones de onda espaciales normalizadas, simétrica y antisimétrica, ante el intercambio de orbitales a y b de dos electrones en la molécula de hidrógeno:

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) + \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)) \quad (2.25)$$

y

$$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) - \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)) \quad (2.26)$$

Sea $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, el operador que suma los espines de los dos electrones. Los autoestados de S^2 y S^z , son tales que $S^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$ y $S^z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$, donde $l = 0, 1$ y $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. En general se considera $\hbar = 1$. Así, para $l = 0$, tenemos un único autoestado $|0, 0\rangle$, que se puede expandir en función de los autoestados de los operadores individuales S_1^z y S_2^z :

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle), \quad (2.27)$$

Este es el estado singlete, donde $S^2 |0, 0\rangle = 0(0 + 1) |0, 0\rangle = 0$. Por otro lado, el autoestado $|1, m\rangle$, donde $m = -1, 0, 1$ es triplemente degenerado en relación a S^2 , ya que $S^2 |1, m\rangle = 1(1 + 1) |1, m\rangle = 2 |1, m\rangle$. Su expansión en función de los operadores individuales S_1^z y S_2^z , según el valor de m , es dado por:

$$|1, -1\rangle = |--\rangle, \quad (2.28)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \quad (2.29)$$

$$|1, 1\rangle = |++\rangle, \quad (2.30)$$

Por esa razón se le denomina triplete.

Por otro lado, el operador S^2 puede expandirse tal como

$$(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2. \quad (2.31)$$

Entonces,

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}S^2 - \frac{1}{2}S_1^2 - \frac{1}{2}S_2^2. \quad (2.32)$$

Ahora, considerando que $S_1^2 |\pm, \pm\rangle = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) |\pm, \pm\rangle = \frac{3}{4} |\pm, \pm\rangle$ y, tenemos que $S_2^2 |\pm, \pm\rangle = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) |\pm, \pm\rangle = \frac{3}{4} |\pm, \pm\rangle$

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 |0, 0\rangle = \frac{1}{2}S^2 |0, 0\rangle - \frac{1}{2}(S_1^2 |0, 0\rangle + S_2^2 |0, 0\rangle). \quad (2.33)$$

De esta manera, para el singlete tenemos,

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 |0, 0\rangle = -\frac{3}{4} |0, 0\rangle \quad (2.34)$$

y para el triplete

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 |1, m\rangle = \frac{1}{4} |1, m\rangle, \text{ donde } m = -1, 0, 1. \quad (2.35)$$

Por otro lado, siendo los dos electrones de la molécula de hidrógeno un sistema de fermiones idénticos, la función de onda total debe ser antisimétrica. Es decir, el producto tensorial de la función de onda espacial y la del espín debe ser antisimétrica. Es decir, si la espacial es simétrica, la de espín debe ser antisimétrica, y si la espacial

es antisimétrica, la del espín será simétrica. Así, considerando que el estado triplete $|1, m\rangle$, donde $m = -1, 0, 1$, es simétrico, ya que $|--\rangle$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$ y $|++\rangle$, son simétricas al permutar los espines, y el estado singlete $|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$ es obviamente antisimétrico, podemos entonces definir los estados $|E_t\rangle$ y $|E_s\rangle$, ambos antisimétricos, tal que:

$$|E_s\rangle = |\psi_S\rangle \otimes |0, 0\rangle \quad (2.36)$$

y

$$|E_t\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |1, m\rangle, \text{ donde } m = -1, 0, 1, \quad (2.37)$$

donde los índices t y s , se refieren al estado de simetría de la parte de espín (ya que $|0, 0\rangle$ es antisimétrica y $|1, m\rangle$ es simétrica). Debemos recordar que $|E_t\rangle$ y $|E_s\rangle$ tendrían la misma energía si no se considerase la interacción entre los electrones de la molécula de hidrógeno pero al considerar la interacción entre estos se tiene que $E_t \neq E_s$.

De igual manera tenemos que:

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 |E_t\rangle = -\frac{3}{4} |E_t\rangle \quad (2.38)$$

y

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 |E_s\rangle = \frac{1}{4} |E_s\rangle. \quad (2.39)$$

Entonces, el Hamiltoniano cuyos autoestados corresponden a las energías E_t y E_s del sistema de dos electrones en la molécula de hidrógeno, puede expresarse en función del operador $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ de la siguiente forma:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{4}(E_t + 3E_s) - (E_t - E_s)\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (2.40)$$

ya que es fácil notar que este Hamiltoniano solo opera en los estados de espín y se verifica que $\hat{\mathcal{H}} |E_t\rangle = E_t |E_t\rangle$ y $\hat{\mathcal{H}} |E_s\rangle = E_s |E_s\rangle$.

Podemos ahora considerar también que según el tratamiento de Heitler y London ($E_t - E_s$) es aproximadamente $-2J$, donde J es la integral de intercambio. Así tenemos:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{4}(E_t + 3E_s) + 2J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (2.41)$$

y considerando cero la constante aditiva al término que contiene el producto de operadores de espín, tenemos el Hamiltoniano de Heisenberg para dos espines:

$$\hat{\mathcal{H}} = J'\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2, \quad (2.42)$$

donde $J' = 2J$.

Hasta aquí es necesario resaltar que “los estados triplete y singlete pertenecen a un nivel degenerado”, esto es $E_s = E_t$. Sin embargo, cuando se considera el potencial de interacción entre los electrones de la molécula de hidrógeno se quiebra la degeneración, y eso hace que se desdoble el nivel energético, algo parecido al efecto Zeeman, entonces E_s y E_t ya no tienen el mismo valor, lo que significa que ahora la energía del estado singlete ya no es la misma que la del estado triplete.

La aproximación de Heitler-London[31] explica como la diferencia de energías E_t y E_s depende de la integral de intercambio, lo cual induce a construir un Hamiltoniano efectivo que solo dependa de los operadores de espín a fin de considerar el problema del ordenamiento de espines, lo que da surgimiento al modelo de Heisenberg.

Es digno de notar que el signo $E_t - E_s$ nos dice cual de los estados es el de menor energía, además el estado triplete $|++\rangle$, $|+-\rangle$ y $|-+\rangle$ es ferromagnético porque tiene espín total $S = 1$, lo cual quiere decir que tendremos espines en la misma dirección, mientras que el estado singlete es antiferromagnético que tiene espín total $S = 0$, lo cual quiere decir que tendremos espines antiparalelos. Así, si $E_t - E_s$ es positivo la energía que predominaría sería la del estado asociado con el triplete es decir el sistema estaría en estado ferromagnético, esto es, con espines ordenados como se dijo en parrafos anteriores. El aporte de Heitler-London en este caso es que consiguieron fundamentar cuantitativamente el ordenamiento ferromagnético y antiferromagnético cuánticamente, antes no había explicación para el fenómeno ya que la interacción dipolar clásica como se dijo antes no justifica la energía de ordenamiento ferromagnética. Entonces podemos decir que la fuerza responsable del ordenamiento magnético es la interacción de intercambio, la cual no tiene análogo clásico y surge netamente de consideraciones cuánticas de antisimetría de partículas idénticas. Para un sistema de espines podemos expresar el Hamiltoniano de la siguiente forma:

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{\{i,j\}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.43)$$

donde para $J > 0$, los espines tienden a alinearse en paralelo para minimizar la energía, y cuando $J < 0$ los espines tienden a ser antiparalelos, por la misma razón. De esta manera se ha justificado la forma del Hamiltoniano de Heisenberg, que es la base para el Hamiltoniano de Ising.

2.1.2. Campo cristalino y Anisotropía Magnética

Discutiremos ahora la interacción electrostática de Coulomb sobre los electrones de una red de iones. Podemos suponer razonablemente que una distribución de cargas de un ión en un cristal esta vinculado a una distribución de iones a su alrededor. El campo electrostático que una red crea sobre los iones es llamado campo cristalino y tiene importantes consecuencias para las propiedades magnéticas de los materiales[32]. Los efectos del campo cristalino sobre los estados electrónicos de los iones esta intimamente relacionado con la simetría de la red. Consideremos como ejemplo seis cargas iguales q , a distancias a y b del origen, notemos que existe una simetría axial en torno del eje Z.

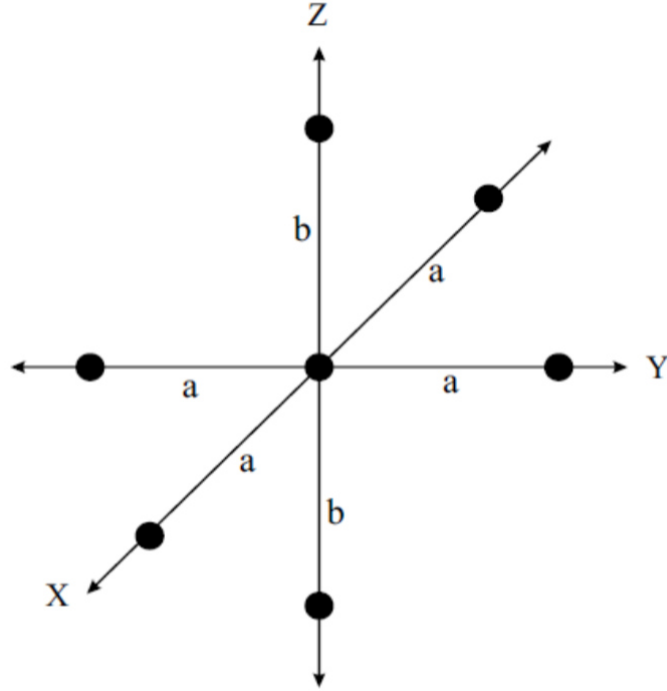


Figura 2.2: Ejemplo de campo cristalino de anisotropía con simetría en torno al eje z. Aquí tenemos seis cargas q a distancias a y b del origen.

El potencial electrostático sobre un electrón con coordenada r lo obtenemos de:

$$V(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|r - a\hat{i}|} + \frac{1}{|r + a\hat{i}|} + \frac{1}{|r - a\hat{j}|} + \frac{1}{|r + a\hat{j}|} + \frac{1}{|r - b\hat{k}|} + \frac{1}{|r + b\hat{k}|} \right) \quad (2.44)$$

Haciendo uso de la aproximación:

$$\frac{1}{|r \pm a\hat{i}|} \approx \frac{1}{a} \mp \frac{x}{a^2} - \frac{r^2}{2a^3} + \frac{3x^2}{2a^3}$$

valido para $r \ll a, b$, obtenemos:

$$V(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{b^3} - \frac{1}{a^3} \right) (3z^2 - r^2 + \text{constante})$$

Ahora usando la forma de este potencial se puede escribir la expresión para el Hamiltoniano de un campo con simetría axial:

$$\mathcal{H}_{cc} = A(3z^2 - r^2) \quad (2.45)$$

donde $A = \left(\frac{q}{4\pi\epsilon_0}\right)(b^{-3} - a^{-3})$ que puede ser positivo o negativo.

Ahora por tanto una descripción mas realista de un campo magnético en un cristal tiene que tomar en cuenta la suma de la interacción magnética a la contribución del campo cristalino de la siguiente manera:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_m + \mathcal{H}_{cc} \quad (2.46)$$

donde \mathcal{H}_m puede describir por ejemplo la interacción con un campo molecular.

Ahora este término es escrito en términos de operadores de momento angular del átomo, por ejemplo se le puede expresar así:

$$\hat{\mathcal{H}}_m = -g\mu_B B_0 J_z \quad (2.47)$$

donde g es el factor de Landé y μ_B es el magnetón de Bohr.

\mathcal{H}_{cc} es escrito en términos de coordenadas espaciales del electrón, pero es posible asociar operadores de posición con operadores de momento angular mediante el teorema de Wigner-Eckart[33]. El teorema establece que dentro de un grupo de estados cuánticos caracterizados por un valor dado J , los elementos de matriz de operadores electrónicos son proporcionales unos a otros, como es el caso por ejemplo entre el momento magnético y el momento angular. Así los elementos de la matriz de operadores de posición son proporcionales a los operadores J_z^2 . Para el caso del campo cristalino con simetría axial que estamos analizando, el operador equivalente será:

$$\hat{\mathcal{H}}_{cc} = B(3J_z^2 - J^2) \quad (2.48)$$

Si cambiamos el operador J por el operador S para un sistema de N espines y tomamos en cuenta que en este modelo solo importa la proyección z del espín, tenemos el Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = D \sum_i S_i^2 \quad (2.49)$$

donde D es la constante de anisotropía.

2.1.3. Modelaje del Paramagnetismo

En esta sección se discutirá el paramagnetismo y lo que implica.

Sea \mathcal{H} un operador hamiltoniano. Al expresar \mathcal{H} en su forma diagonal tenemos:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{n=1}^N E_n |n\rangle \langle n| \quad (2.50)$$

Siendo N el número de autoestados de $\hat{\mathcal{H}}$, considerando que $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ la condición de ortonormalidad de los estados $|n\rangle$. Observamos entonces que :

$$\hat{\mathcal{H}} |n\rangle = E_n |n\rangle, \text{ donde } \forall n = 1, \dots, N \quad (2.51)$$

Definimos ahora el operador de densidad, tal que:

$$\hat{\rho} = \sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n| W_n, \text{ donde } W_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}} \quad (2.52)$$

Notese que W_n es la probabilidad de que el sistema tenga energía E_n al estar en contacto con un foco térmico a temperatura $T = 1/\beta$. Podemos notar que la traza de $\hat{\rho}$ es igual a 1:

$$\begin{aligned} \text{traza}(\hat{\rho}) &= \sum_{n=1}^N \langle n | \hat{\rho} | n \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n=1}^N \langle n | \left(\sum_{m=1}^N |m\rangle e^{-\beta E_m} \langle n| \right) | n \rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle n | m \rangle e^{-\beta E_m} \langle m | n \rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \delta_{n,m} e^{-\beta E_m} \delta_{m,n} \\ &= \frac{\mathcal{Z}}{\mathcal{Z}} = 1 \end{aligned} \quad (2.53)$$

Por otro lado, si \hat{A} es un observable físico, entonces podemos representarlo en la base $|n\rangle$.

Veamos:

$$\hat{A} = \mathbb{1} \cdot \hat{A} \cdot \mathbb{1}$$

donde $\mathbb{1} = \sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n|$ es el operador unidad en la base $|n\rangle$.

Entonces:

$$\hat{A} = \left(\sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n| \right) \hat{A} \left(\sum_{m=1}^N |m\rangle \langle m| \right) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N |n\rangle \langle n| \hat{A} |m\rangle \langle m| \quad (2.54)$$

Así tenemos que:

$$\hat{A} = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N |n\rangle A_{n,m} \langle m| = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N A_{n,m} |n\rangle \langle m| \quad (2.55)$$

Ahora vamos a multiplicar $\hat{\rho}$ por \hat{A} .

$$\hat{\rho} \cdot \hat{A} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(\sum_{n=1}^N e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n| \right) \cdot \left(\sum_{m=1}^N \sum_{p=1}^N A_{m,p} |m\rangle \langle p| \right) \quad (2.56)$$

$$\hat{\rho} \cdot \hat{A} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{p=1}^N |n\rangle \langle n | m \rangle \langle p | A_{m,p} e^{-\beta E_n} \quad (2.57)$$

$$\hat{\rho} \cdot \hat{A} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^N |n\rangle \delta_{n,m} \langle p| A_{n,p} e^{-\beta E_n} \quad (2.58)$$

$$\hat{\rho} \cdot \hat{A} = \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^N A_{n,p} \frac{e^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}} |n\rangle \langle p| \quad (2.59)$$

Calculando la traza de $\hat{\rho} \cdot \hat{A}$ resulta lo siguiente:

$$\begin{aligned} \text{traz}(\hat{\rho} \cdot \hat{A}) &= \sum_{q=1}^N \langle q| \hat{\rho} \cdot \hat{A} |q\rangle \\ &= \sum_{q=1}^N \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^N A_{np} \frac{e^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}} \langle q|n\rangle \langle p|q\rangle \\ &= \sum_{q=1}^N \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^N A_{np} \frac{e^{-\beta E_n}}{\mathcal{Z}} \delta_{q,n} \delta_{p,q} \\ &= \sum_{q=1}^N A_{q,q} \frac{e^{-\beta E_q}}{\mathcal{Z}} = \langle \hat{A} \rangle \\ &= \sum_{q=1}^N A_{q,q} W_q = \langle \hat{A} \rangle \end{aligned} \quad (2.60)$$

Por consiguiente, el valor medio térmico de A viene dado por $\langle \hat{A} \rangle = \text{traz}(\hat{\rho} \cdot \hat{A})$.

La energía de interacción de un espín con un campo magnético externo esta dado por: $\hat{\mathcal{H}} = -\vec{H} \cdot \vec{S}$ [35] siendo

$$\begin{aligned} \vec{S} &= \hat{S}_x \hat{x} + \hat{S}_y \hat{y} + \hat{S}_z \hat{z} \\ \hat{S}_x &= \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x, \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y \\ \hat{S}_z &= \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z \end{aligned} \quad (2.61)$$

donde \hat{S}_x , \hat{S}_y y \hat{S}_z son las matrices de Pauli, tal que:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.62)$$

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.63)$$

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.64)$$

Si el campo magnético \vec{H} está en la dirección \hat{z} , entonces $\hat{\mathcal{H}} = -H\hat{S}_z$, donde $\vec{H} = H\hat{z}$.

Entonces $\hat{\mathcal{H}} = -H\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Definiendo los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$, tenemos

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.65)$$

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.66)$$

y calculando los siguientes productos tensoriales:

$$\begin{aligned} |+\rangle \langle +| &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ |+\rangle \langle +| &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.67)$$

$$\begin{aligned} |-\rangle \langle -| &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ |-\rangle \langle -| &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.68)$$

podemos ver que:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= -H\frac{\hbar}{2} |+\rangle \langle +| + H\frac{\hbar}{2} |-\rangle \langle -| \\ &= -H\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + H\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= -H\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -H\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z \end{aligned} \quad (2.69)$$

Por conveniencia vamos a considerar $\hbar/2 = 1$, entonces $\hat{\mathcal{H}} = -H\hat{\sigma}_z$, donde $\hat{\sigma}_z = |+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|$

La matriz de densidad correspondiente sera: $\hat{\rho} = W_+ |+\rangle \langle +| + W_- |-\rangle \langle -|$ donde $W_+ = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$ y $W_- = \frac{e^{\beta H}}{Z}$.

Entonces, el promedio térmico de $\langle \hat{\sigma}_z \rangle$, esta dado por:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\sigma}_z \rangle &= \text{traza}(\hat{\rho} \cdot \hat{\sigma}_z) \\
&= \text{traza}((W_+ |+\rangle \langle +| + W_- |-\rangle \langle -|)(|+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|)) \\
&= \text{traza}(W_+ |+\rangle \langle +| - W_- |-\rangle \langle -|) \\
&= W_+ - W_- = \frac{e^{-\beta H} - e^{\beta H}}{Z} \\
&= W_+ - W_- = -\tanh(\beta H) \\
&\Rightarrow \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = H \tanh(\beta H)
\end{aligned} \tag{2.70}$$

Este formalismo se puede simplificar considerando un Hamiltoniano clásico $\mathcal{H} = -H\sigma$, donde σ es una variable de Ising, tal que $\sigma = \pm 1$. El modelo paramagnético considera un sistema de N espines independientes que pueden interactuar con un campo magnético externo H . El hamiltoniano representativo es:

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{i=1}^N H \sigma_i, \quad \text{donde} \quad \sigma_i = \pm 1 \tag{2.71}$$

Vamos a calcular la función de partición del sistema de N espines

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\sigma_1=-1}^1 \sum_{\sigma_2=-1}^1 \dots \sum_{\sigma_{N-1}=-1}^1 \sum_{\sigma_N=-1}^1 e^{\sum_{i=1}^N \beta H \sigma_i} \\
&= \sum_{\sigma_1=-1}^1 e^{\beta H \sigma_1} \sum_{\sigma_2=-1}^1 e^{\beta H \sigma_2} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=-1}^1 e^{\beta H \sigma_{N-1}} \sum_{\sigma_N=-1}^1 e^{\beta H \sigma_N} \\
&= \prod_{i=1}^N \sum_{\sigma_i=-1}^1 e^{\beta H \sigma_i} = \prod_{i=1}^N (e^{\beta H} + e^{-\beta H}) \\
&= (e^{\beta H} + e^{-\beta H})^N = 2^N \cosh^N(-\beta H) \\
&\Rightarrow \mathcal{Z} = 2^N \cosh^N(-\beta H)
\end{aligned} \tag{2.72}$$

Note que $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_1^N$, donde $\mathcal{Z}_1 = 2 \cosh(-\beta H)$ es la función de partición de un único espín que interactúa con el campo H . En general, cuando un sistema está formado por partículas independientes la función de partición es igual al producto de las funciones de partición de cada partícula.

Para calcular la magnetización del sistema de N espines tenemos que: $M = \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle$

la magnetización por espín esta dada por:

$$\frac{M}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle \tag{2.73}$$

donde $\langle \sigma_i \rangle$ es el promedio térmico de σ_i .

Entonces :

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \rangle &= \sum_{\sigma_1=-1}^1 \sum_{\sigma_2=-1}^1 \dots \sum_{\sigma_{N-1}=-1}^1 \sum_{\sigma_N=-1}^1 \sigma_i \frac{e^{-\beta \mathcal{H}}}{\mathcal{Z}} \\
&= \frac{\sum_{\sigma_1=-1}^1 e^{\beta H \sigma_1} \sum_{\sigma_2=-1}^1 e^{\beta H \sigma_2} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=-1}^1 e^{\beta H \sigma_{N-1}} \sum_{\sigma_N=-1}^1 e^{\beta H \sigma_N}}{\mathcal{Z}} \\
&= \left(\frac{\prod_{j \neq i} \sum_{\sigma_j=-1}^1 e^{\beta H \sigma_j}}{\mathcal{Z}_1^{N-1}} \right) \left(\frac{\sum_{\sigma_i=-1}^1 e^{\beta H \sigma_i}}{\mathcal{Z}_1} \right) \\
&= \langle \sigma_i \rangle = \frac{e^{\beta H} - e^{-\beta H}}{\mathcal{Z}_1} \\
&= \langle \sigma_i \rangle = \frac{2 \sinh(\beta H)}{2 \cosh(\beta H)} \\
&= \langle \sigma_i \rangle = \tanh(\beta H) \\
&\Rightarrow \langle \sigma_i \rangle = \tanh(\beta H) \quad (2.74)
\end{aligned}$$

notar que:

$$\langle \sigma_1 \rangle = \langle \sigma_2 \rangle = \dots = \langle \sigma_i \rangle = \dots = \langle \sigma_N \rangle = \tanh(\beta H) \quad (2.75)$$

Entonces:

$$\begin{aligned}
m &= \sum_{i=1}^N \frac{\langle \sigma_i \rangle}{N} = \frac{N \tanh(\beta H)}{N} \\
\Rightarrow m &= \tanh(\beta H) = \langle \sigma_i \rangle \quad \forall i = 1, 2, \dots, N \quad (2.76)
\end{aligned}$$

Note que si $H = 0 \Rightarrow m = \tanh(\beta 0) = 0$, esto significa que la magnetización por espín total es cero sin la presencia de un campo externo.

Por consiguiente, en un sistema paramagnético no hay magnetización espontánea, ya que sin la presencia de un campo $\langle \sigma_i \rangle = 0$, $\forall i$, lo que significa que hay un desorden magnético, solo existe una magnetización inducida cuando $H \neq 0$.

2.2. Transiciones de fase

Definimos primero a “fase” como una porción de un sistema que tiene propiedades fisicoquímicas homogéneas y una transición de fase es un cambio drástico en su comportamiento termodinámico; una transición de fase ocurre cuando el estado termodinámico de un sistema cambia cualitativamente como una función de alguna restricción externa impuesta, puede ser por ejemplo, la temperatura, la presión, el campo magnético, entre otros. Los antecedentes del estudio de los fenómenos críticos datan desde Van der Waals quien en 1873 en su tesis de doctorado planteo la primera teoría sobre la continuidad entre estados líquido y gaseoso de la materia. Pierre Curie realizó estudios acerca de la transición ferromagnética desde inicios del siglo XX y fue desarrollada por Pierre Weiss, estas teorías y la de Van der Waals son teorías clásicas de

las transiciones de fase. A partir de los años 60 del siglo pasado se estudió con más profundidad las transiciones clásicas pues se desarrollaron las técnicas experimentales necesarias para estudiar las magnitudes termodinámicas en el entorno de los conocidos puntos críticos, propiedades como calor específico, compresibilidad o susceptibilidad magnética tienen un comportamiento singular en las proximidades del punto crítico, en la región crítica.

El comportamiento termodinámico en cada fase es caracterizado por el parámetro de orden. Por ejemplo, en el estudio del magnetismo, para un material ferromagnético un conjunto de espines atraviesa desde un estado desordenado sin magnetización a un estado con magnetización diferente de cero, el parámetro de orden mide el grado de ordenamiento del sistema en este caso y aquí es justamente la magnetización, que es proporcional a la suma de los vectores de espín. En este caso el ferromagneto experimenta una transición de fase continua donde la magnetización crece suavemente desde cero al bajar la temperatura desde una temperatura llamada crítica. Para un sistema es posible la existencia de más de un parámetro de orden para una transición. Para conocer las propiedades termodinámicas de un material es importante el estudio de las transiciones de fase que éste experimenta y para ello es necesario valernos de la mecánica estadística.

Sabemos que toda la información estadística de un sistema está contenida en la función de partición \mathcal{Z} y además que la energía libre de un sistema está dada por:

$$F = -K_B \ln \mathcal{Z}.$$

Ehrenfest fue quien clasificó las transiciones de fase por el grado de no analiticidad en la energía, así las transiciones de fase pueden ser clasificadas de acuerdo al orden de la derivada de la energía libre respecto de la cual existe discontinuidad. Si podemos calcular la energía libre de un sistema, entonces será posible calcular muchas de las cantidades termodinámicas que nos interesen; pero el problema surge debido a que no siempre es posible obtener la energía libre de forma analítica, es más, esto es solo posible para algunos pocos casos, por ejemplo en los modelos de Ising. Ahora es posible analizar la naturaleza misma de la transición por ejemplo, cuando un sistema se somete a un cambio cualitativo y desarrolla un orden donde antes no había, ello nos dice que el sistema ha variado abruptamente en función de algún parámetro como puede ser por ejemplo la temperatura. La energía libre en este caso será una función de la temperatura T , $f(T)$ y matemáticamente aquí la energía libre es no analítica y la deducción de ello es de vital importancia en la teoría de transiciones de fase. Una función no analítica es aquella que presenta singularidades, es decir sus derivadas no están definidas en algún o algunos puntos y la transición de fase se da justo en estos puntos que son singularidades de la función energía libre. Justamente una transición de primer orden implicará una singularidad en la primera derivada de la energía libre y una transición de segundo orden implicará una singularidad en la segunda derivada de la energía libre como ya se dijo antes.

Tomando como ejemplo un sistema de espines, la magnetización sería el parámetro de orden a usar y la curva de magnetización en función de la temperatura puede indicar si la transición de fase es de primer o de segundo orden. Si la magnetización muestra un salto de discontinuidad donde la temperatura es crítica la transición es de primer

orden(ver fig. 2.3). Si la magnetización cambia constantemente desde un valor cero a uno diferente de cero la transición será de segundo orden(ver fig. 2.4).

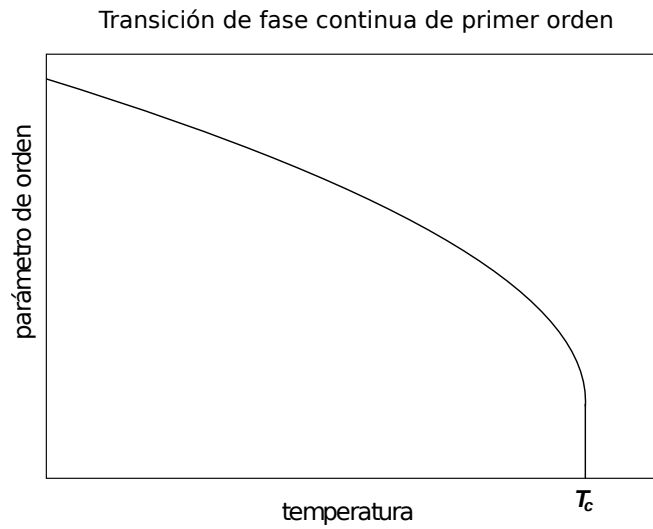


Figura 2.3: Ejemplo gráfico de una transición de fase de primer orden.

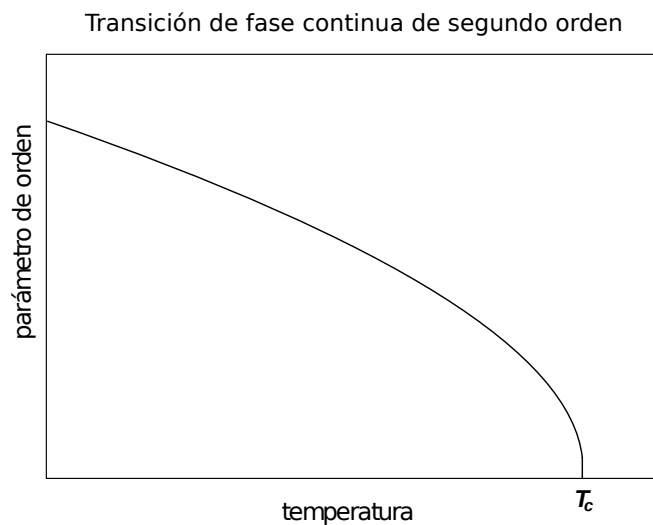


Figura 2.4: Ejemplo gráfico de una transición de fase de segundo orden.

En las figuras 2.3 y 2.4 se ve las temperaturas críticas de primer o segundo orden según sea el caso. En un sistema se puede hacer una colección de T_C versus algún otro parámetro como por ejemplo la presión y de esta manera formar un diagrama que lleva el nombre de “diagrama de fases”, este diagrama muestra las fases que existen en el sistema de estudio(en la figura 2.5 se muestra el diagrama de fases para el agua). Cuando se da el caso en que una frontera pasa de ser de primer orden a segundo orden el punto donde se da el paso recibe el nombre de “punto tricrítico”. Si tenemos un punto que divide a varias fases, este punto recibe el nombre de “punto multicrítico” .

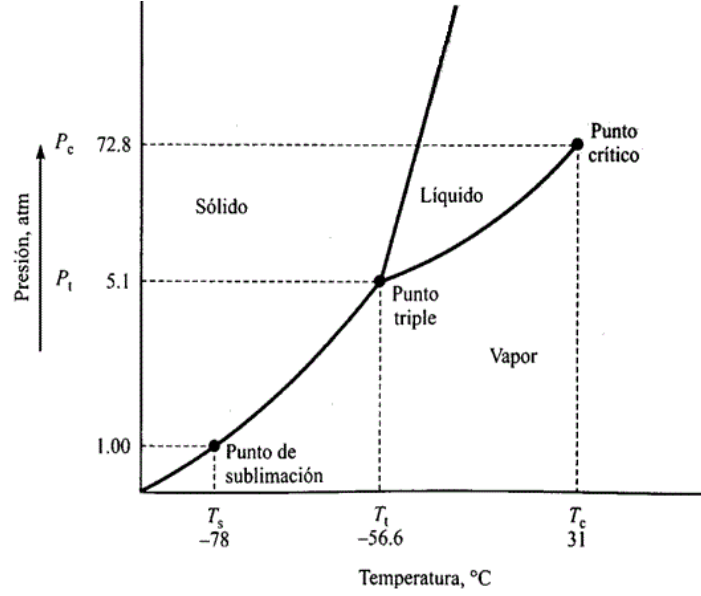


Figura 2.5: Diagrama de fases del agua.

2.3. Teoría de Landau

La teoría de Landau ofrece una ruta para estudiar la energía libre. Sin entrar en los detalles matemáticos diremos que esta teoría comienza considerando las simetrías del parámetro de orden. La energía libre tiene que ser invariante bajo la transformación de inversión ($m = -m$) a temperaturas cercanas a T_C . El parámetro de orden tiene que ser pequeño en la vecindad de el punto crítico como es el caso para una transición de segundo orden. La idea es expandir la energía libre en una serie de potencias[34, 35], de la forma:

$$f(m, \nabla m) = -hm + A_2 m^2 + A_3 m^3 + A_4 m^4 + \dots + K(\nabla m)^2 \quad (2.77)$$

donde h es un campo magnético externo, y los coeficientes A_2 , A_3 , A_4 y K dependen de las características del modelo en estudio. En nuestro caso consideramos $\nabla(m) = 0$ pues consideramos homogénea espacialmente a la magnetización.

En la presente tesis obtendremos el valor de la temperatura crítica teórica usando la teoría de Landau, realizando la expansión de la energía libre obtenida analíticamente. Como ejemplo veamos el cálculo de la temperatura crítica T_C para el modelo de Ising con espín 1 en la aproximación de campo para una cadena lineal.

Partimos del siguiente Hamiltoniano:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + D \sum_{i=1}^N S_i^2. \quad (2.78)$$

Donde S_i puede tomar valores $-1, 0, 1$, y N es el número de espines y D es la constante de anisotropía. Obtenemos ahora la función de partición:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} e^{\frac{\beta J}{2N} (\sum_{i=1}^N S_i)^2 - \beta D \sum_{i=1}^N S_i^2} \quad (2.79)$$

Usando la aproximación Hubbard-Stratovich con $x = \sum_{i=1}^N S_i$.

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{N\beta J y^2}{2} + \beta J x y} dy \prod_{i=1}^N e^{-\beta D S_i^2} dy \quad (2.80)$$

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{N\beta J y^2}{2}} \prod_{i=1}^N e^{-(\beta J S_i y + \beta D S_i^2)} dy \quad (2.81)$$

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{N\beta J y^2}{2}} \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N e^{-(\beta J S_i y + \beta D S_i^2)} dy \quad (2.82)$$

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{N\beta J y^2}{2} + N \ln [2e^{-\beta D} \cosh \beta J y + 1]} dy \quad (2.83)$$

Con la aproximación de punto silla obtenemos la energía libre por espín:

$$f(y) = \frac{Jy^2}{2} - \frac{1}{\beta} \ln [2e^{-\beta D} \cosh \beta J y + 1] \quad (2.84)$$

Como se verá después y en apéndice D la variable de integración y que minimiza a la función energía libre es justamente la magnetización por lo que la ecuación anterior queda de la siguiente manera:

$$f(m) = \frac{Jm^2}{2} - \frac{1}{\beta} \ln [2e^{-\beta D} \cosh \beta J m + 1] \quad (2.85)$$

Ahora se puede escribir la energía libre cerca de la transición de fase como un desarrollo en serie de potencias en términos del parámetro de orden m .

$$f(m) = f(0) + A_2 m^2 + A_4 m^4 + A_6 m^6 + O(m^8) \dots \quad (2.86)$$

Donde los términos de potencia impar deben ser cero por razones de simetría de la energía libre respecto de la magnetización m .

$$A_2 = f''(0) \quad (2.87)$$

Este término depende de la temperatura y de aquí se puede obtener aquel valor de T_C que hace m cero, la temperatura crítica.

$$f''(m, \beta, D) = J - \frac{2J^2 \beta e^{-\beta D} \cosh \beta J m (2e^{-\beta D} \cosh \beta J m + 1) - 4J^2 \beta e^{-\beta D} \sinh^2 \beta J m}{2e^{-\beta D} \cosh \beta J m + 1} \quad (2.88)$$

Haciendo $m = 0$ obtenemos:

$$J - \frac{2J^2 \beta e^{-\beta D}}{2e^{-\beta D} + 1} = 0 \quad (2.89)$$

Haciendo $D = 0$:

$$1 - \frac{2}{3}J\beta = 0 \quad (2.90)$$

Sabemos que $\beta = \frac{1}{k_B T}$. De aquí obtenemos $T = T_C = 2/3$ en unidades temperatura reducida que es lo que se deseaba encontrar. Ahora para este mismo modelo calcularemos el valor de la temperatura para el punto tricrítico, esto es, el valor de la temperatura donde se da el cambio de transición de segundo orden a primer orden. Para ello de igual manera se realizará una expansión en serie de potencias, pero ahora para la magnetización, es la misma expansión de Landau[36].

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + \dots \quad (2.91)$$

Donde la magnetización m se obtiene minimizando la función densidad de energía libre ($f' = 0$) de donde se obtiene:

$$m = \frac{2J e^{-\beta D} \sinh \beta J m}{1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta J m} \quad (2.92)$$

Las condiciones para obtener el punto tricrítico, esto es, las coordenadas D y T serán, $A_1 = 1$ y $A_3 = 0$, donde $A_1 = m'(0)$ y $m'''(0)$, ello se sabe por la teoría de transiciones de fase.

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{2e^{-\beta D} \beta J + 4\beta J e^{-2\beta D}}{(1 + 2e^{-\beta D})^2} = 1 \\ A_3 &= \frac{2e^{-\beta D} \beta^3 J^3 (1 + 2e^{-\beta D}) - 4e^{-\beta D} \beta^3 J^3 (2e^{-\beta D} + 4e^{-2\beta D})}{(1 + 2e^{-\beta D})^3} = 0 \end{aligned} \quad (2.93)$$

Resolviendo el sistema obtendremos $T = \frac{1}{3}$ y $D = \frac{\ln 4}{3}$ que son las coordenadas del punto tricrítico.

2.4. Modelo de Ising

2.4.1. Introducción

El modelo de Ising fue ideado por Wilhelm Lenz para estudiar el comportamiento de materiales ferromagnéticos en 1920 y lo propuso a su estudiante de Post-doctorado Ernst Ising quien resolvió el problema en 1924[37], de allí el nombre de modelo Ising.

El problema que Lenz le propuso a Ising fue sobre la transición ferromagnética. Un material ferromagnético es lo que llamaríamos en términos muy simples un imán. La transición ferromagnética tiene lugar al aumentar la temperatura; superada cierta temperatura crítica denominada temperatura de Curie el material pierde sus propiedades magnéticas. Básicamente, lo que ocurre es que los materiales ferromagnéticos están

compuestos por lo que llamaríamos unidades, esto es por ejemplo, moléculas, átomos, agregados moleculares, electrones, etc, que presentan momento magnético (que para partículas subatómicas es una extraña propiedad cuántica llamada espín), es decir, que responden a campos electromagnéticos que se les apliquen. Por debajo de la temperatura de Curie, estas unidades están aproximadamente alineadas y tienden a apuntar en la misma dirección. De esta manera, el material presenta una imanación espontánea. Cuando la temperatura supera la de Curie, los espines se desordenan y dejan de apuntar en la misma dirección perdiendo así sus propiedades magnéticas.

Cuando el modelo se plantea de una manera realista se encuentra con que es bastante difícil de resolver matemáticamente; Lenz realizó una simplificación e idealización lo más sencillo posible pero que permitiese estudiar la transición ferromagnética. Así, el modelo está definido como una colección discreta de variables llamadas espines que podrían representar momentos magnéticos, que pueden tomar el valor 1 ó -1, también arriba ó abajo y que interactúan con sus primeros vecinos. Ising demostró que en una dimensión no existía tal transición de fase, provocando en él una profunda decepción que lo hizo abandonar la física estadística.

El modelo bidimensional en el cual cada espín interactúa con sus cuatro vecinos (arriba, abajo, izquierda y derecha) fue resuelto exactamente por Lars Onsager [38] en 1944, demostrando que se produce una transición de fase a una temperatura mayor que cero, lo cual demostró que este modelo podía ser útil para explicar transiciones de fase entre estados ferromagnéticos y paramagnéticos. A partir de entonces el modelo ha sido usado tanto en la física estadística como en economía e inclusive en ciencias sociales, dando resultados por cierto muy útiles.

2.4.2. Tratamiento del modelo de Ising en 1D usando la matriz de transferencia

En esta sección se expondrá acerca del método llamado “matriz de transferencia” para resolver el modelo de Ising en 1D.

Supongamos un sistema definido en una red unidimensional de N sitios con condiciones de contorno periódicas y variables discretas $\sigma_i, i = 1, 2, \dots, N$, las que pueden tomar M valores diferentes y que satisfacen: $\sigma_{i+N} = \sigma_i$. Ahora supongamos que existen interacciones solo entre los primeros vecinos, con ello tendríamos el Hamiltoniano expresado de forma general de la siguiente manera:

$$\mathcal{H}(\sigma) = \sum_{i=1}^N [U(\sigma_i) + V(\sigma_i, \sigma_{i+1})] \quad (2.94)$$

donde $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ por las condiciones de periodicidad. Expresemos ahora la función de partición para este Hamiltoniano.

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_i} \exp[-\beta \sum_{i=1}^N (U(\sigma_i) + V(\sigma_i, \sigma_{i+1}))] = \sum_{\sigma_i} \prod_{i=1}^N T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \quad (2.95)$$

con $T(\sigma, \sigma') = \exp[-\beta(U(\sigma)/2 + V(\sigma, \sigma') + U(\sigma')/2)]$. Las funciones $T(\sigma, \sigma')$ son elementos de una matriz $M \times M$, que se conoce como matriz de transferencia[42].

$$\begin{aligned}
Z_N &= \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_3} \dots \sum_{\sigma_N} \left(\sum_{\sigma_2} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \right) T(\sigma_3, \sigma_4) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) \\
&= \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_3} \dots \sum_{\sigma_N} \left(\sum_{\sigma_2} T^2(\sigma_1, \sigma_3) T(\sigma_3, \sigma_4) \right) T(\sigma_4, \sigma_5) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) \\
&\vdots \\
&= \sum_{\sigma_1} T^N(\sigma_1, \sigma_1) = \text{Tr}(T^N) \quad (2.96)
\end{aligned}$$

Esta matriz es simétrica por construcción y con autovalores reales. Si $\lambda_j, j = 1, 2, \dots, M$ son los autovalores de T entonces:

$$Z = \sum_{j=1}^M \lambda_j^N \quad (2.97)$$

Debemos mencionar aquí el Teorema de Perron Frobenius que dice que para una matriz $M \times M$ ($M < \infty$) A , con elementos de matriz $A_{i,j} > 0$ para todo i, j , el mayor autovalor es real y positivo no-degenerado y una función analítica de los elementos de la matriz. Podemos ordenar los autovalores de T de manera que: $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_M$ donde λ_1 por el teorema anterior es una función analítica de $\beta(T > 0)$ y de otros parámetros incluidos en el Hamiltoniano ya que M es finito. Podemos así obtener la energía libre de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\beta f &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln(\lambda_1^N (1 + \sum_{i=2}^M (\lambda_i/\lambda_1)^N)) \\
&= \ln \lambda_1 + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln(1 + \sum_{i=2}^M (\lambda_i/\lambda_1)^N) \\
&= \ln \lambda_1 \quad (2.98)
\end{aligned}$$

Analizemos el modelo de Ising en una dimensión, es decir el caso de una red unidimensional de N sitios y con condiciones periódicas de contorno y variables discretas $\sigma_i = \pm 1$ cuyo Hamiltoniano lo podemos expresar de la siguiente manera:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (2.99)$$

donde h denota la intensidad de campo magnético externo. Ahora podemos expresar la función de partición del sistema mediante:

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_N &= \sum_{\sigma} \left(\beta J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \sum_{i=1}^N \sigma_i \right) \\ &= \sum_{\sigma} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_N, \sigma_1)\end{aligned}\quad (2.100)$$

donde

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp \left[\beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{\beta h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \quad (2.101)$$

Usamos ahora la matriz de transferencia explicada anteriormente.

$$T = \begin{pmatrix} T(+, +) & T(+, -) \\ T(-, +) & T(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J+h)} \end{pmatrix} \quad (2.102)$$

podemos expresar la función de partición como una secuencia de multiplicaciones de matrices:

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\sigma} T_{\sigma_1, \sigma_2} T_{\sigma_2, \sigma_3} \dots T_{\sigma_N, \sigma_1} = \sum_{\sigma_1} [T^N]_{\sigma_1, \sigma_2} = \text{tr } T^N \quad (2.103)$$

de autovalores: $\Gamma_{\pm} = e^{\beta J} \cosh \beta h \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 \beta h + e^{-2\beta J}}$, donde

$$\mathcal{Z}_N = \Gamma_+^N + \Gamma_-^N \sim \Gamma_+^N, \text{ cuando } N \rightarrow \infty.$$

En particular para $h = 0$, encontramos que

$$\mathcal{Z}_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N \sim \lambda_+^N, \text{ donde } \lambda_{\pm} = e^{\beta J} \pm e^{-\beta J}.$$

Encontramos la energía libre por sitio de: $f(h, T) = -\beta^{-1} \ln \lambda_+$ de la que obtenemos la magnetización.

$$m(h, T) = -\frac{\partial f(h, T)}{\partial h} = e^{\beta J} \sinh(\beta h) (e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J})^{-1/2}.$$

De aquí vemos que si el campo h es cero, entonces la magnetización es cero, lo que significa que no hay magnetización espontánea a una temperatura mayor que cero.

En cuanto al modelo de Ising en 2 dimensiones, este fue resuelto por Onsager. El tratamiento que realizó Lars Onsager en 1943 al resolver de forma analítica el modelo de Ising en dos dimensiones es altamente complicado y realizar un estudio del procedimiento abarcaría toda una tesis, por ello se hará referencia a los resultados encontrados por Onsager[38]. Onsager, encontró la ecuación para determinar la temperatura crítica para el modelo de Ising en dos dimensiones.

$$\sinh(2J_1/K_B T_C) \sinh(2J_2/K_B T_C) = 1 \quad (2.104)$$

donde J_1 y J_2 representan la energía de interacción tanto horizontal como vertical, T_C representa la temperatura crítica a partir de la cual se produce la magnetización espontánea. Si analizamos el caso de una red cuadrada isotrópica en las interacciones, es decir $J_1 = J_2$ tendremos $\sinh^2(2J_1/K_B T_C) = 1$
Resolviendo la ecuación encontramos que $T_C = 2,269$ en unidades K_B/J .

2.4.3. Imposibilidad de ordenamiento espontáneo en 1D

Peirls y Landau haciendo uso del balance entre el costo de la energía interna, la ganancia de la entropía y la generación de paredes de dominio mostraron como en el modelo de Ising 1D no existe el ordenamiento para temperatura diferente de cero.[39, 40, 41] En esta sección se usara la energía libre de Helmholtz para demostrar que una cadena de Ising unidimensional no presenta magnetización espontánea. Sea una cadena de N espines de frontera libre que interactúan con el mismo acoplamiento J .

Si los N espines están alineados en paralelo, $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\uparrow$
su energía es:

$$E_0 = -(N - 1)J \quad (2.105)$$

Esta es la configuración que minimiza la energía a temperatura nula. Ahora, a la izquierda de un determinado espín (el m -ésimo espín) vamos a cambiar(flípear) el sentido de todos los otros espines, de la siguiente manera:

$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\downarrow$

Hemos creado entonces una pared de dominio (domain wall), cuya frontera se divide entre el m -ésimo y el $(m + 1)$ -ésimo espín tal que tenemos m espines para arriba y $N - m$ espines para abajo.

La energía de esta nueva configuración es:

$$E_f = -(m - 2)J + J - (N - m)J = 3J - NJ. \quad (2.106)$$

Note que esta energía no depende de m , es decir, la pared de dominio puede estar en cualquier punto de la cadena de espines sin afectar la nueva energía. Por otro lado, el cambio de energía por haber formado una pared de dominio es:

$$\Delta E = E_f - E_0 = 2J. \quad (2.107)$$

El número de posibilidades de escoger una pared de dominio es $N - 1$, por lo tanto, la entropía es:

$$S = K_B \ln(N - 1). \quad (2.108)$$

La configuración inicial con todos los espines paralelos tiene entropía cero por ser de una única forma. Entonces, el cambio de entropía es:

$$\Delta S = K_B \ln(N - 1) \quad (2.109)$$

Podemos decir que una pared de dominio se forma cuando proporcionamos una temperatura infinitesimal al sistema. Entonces, sabiendo que $F = E - TS$, podemos calcular ahora el cambio en la energía libre al haber formado una pared de dominio a temperatura T :

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S = 2J - K_B T \ln(N - 1). \quad (2.110)$$

Para un sistema donde $N \rightarrow \infty$, el cambio de energía libre es negativo, esto significa que para cualquier temperatura la formación de paredes de dominio disminuye la energía libre, lo cual indica que el equilibrio termodinámico se alcanza al desordenarse magnéticamente el sistema de espines, entonces no puede haber ordenamiento espontáneo para $T > 0$, por lo tanto la temperatura crítica del modelo de Ising unidimensional es $T_c = 0$.

Para el caso de una red cuadrada podemos aplicar un argumento similar. Como se ve en la figura 2.6, se puede formar una pared de dominio en cualquier columna de la red.

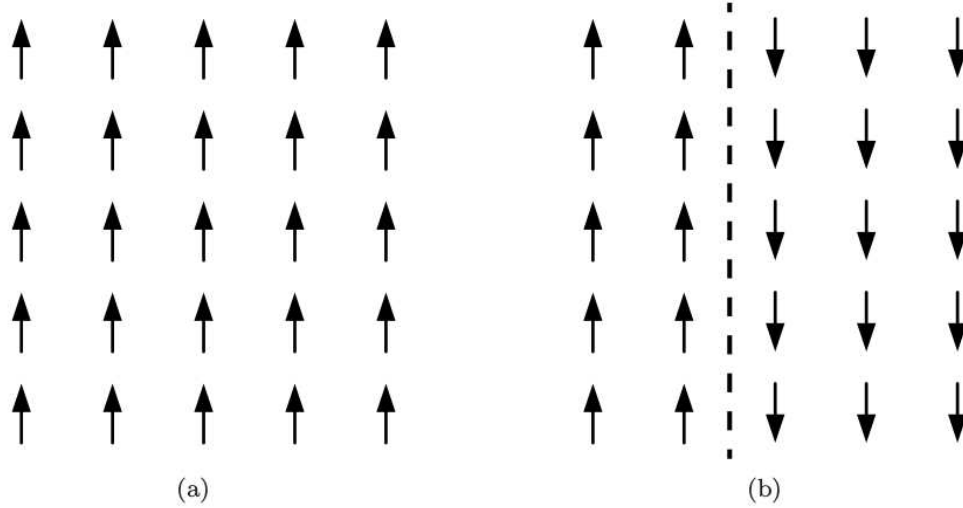


Figura 2.6: La fig. a) muestra una red cuadrada con un solo dominio ferromagnético y la fig. b) muestra una red cuadrada con dos dominios ferromagnéticos.

Si la red es de $L \times L$ espines, el costo energético de formar una pared es $2JL$, y ya que la pared puede ser escogida entre las L columnas, la entropía es al menos del orden de $\ln(L)$. Esto indica que al introducir temperatura al sistema, el cambio de energía libre debido a la formación de una pared de dominio será del orden de:

$$\Delta F \sim 2JL - T \ln(L). \quad (2.111)$$

Podemos ver que para $L \rightarrow \infty$, $L > \ln(L)$, así, la formación de paredes de dominio favorece el equilibrio termodinámico solo cuando $T > 2JL / \ln(L)$. Por consiguiente, el desorden magnético es un estado de equilibrio para temperaturas mayores que un $T_c > 0$. De esta manera probamos que sí existe ordenamiento espontáneo para un intervalo finito de temperaturas para una red bidimensional, y por lo tanto, esto se extiende para dimensiones espaciales superiores.

2.4.4. Modelo de Ising

Partimos del hamiltoniano conocido para el modelo de Ising:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{ij} S_i S_j, \quad S_i = \pm 1 \text{ para } J > 0 \quad (2.112)$$

donde el simbolo (i, j) denota que la sumatoria es entre espines a primeros vecinos. El número de primeros vecinos se denotará por la letra Z , así si $Z = 2$ hay dos vecinos y estamos en 1D, si $Z = 4$ hay cuatro vecinos y estamos en 2D y si $Z = 6$ hay 6 vecinos y estamos en 3D.

Redes Hipercúbicas

Veamos los vecinos que puede tener un espín.

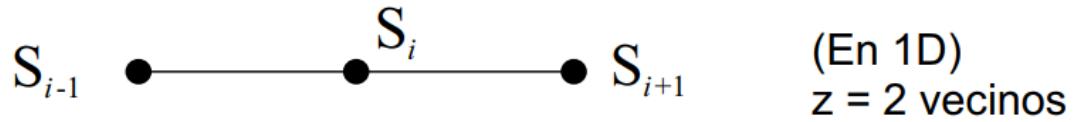


Figura 2.7: Espín S_i con dos vecinos.

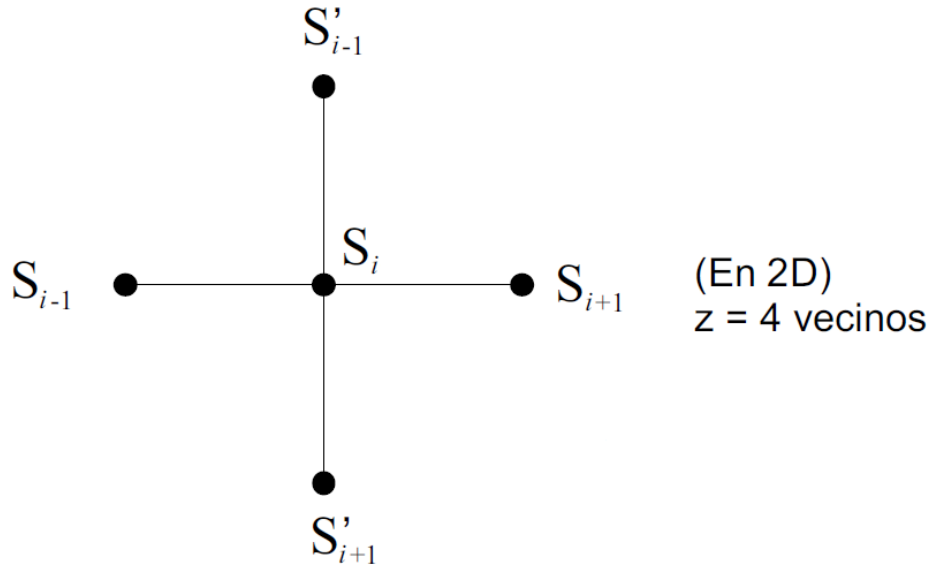


Figura 2.8: Espín S_i con cuatro vecinos.

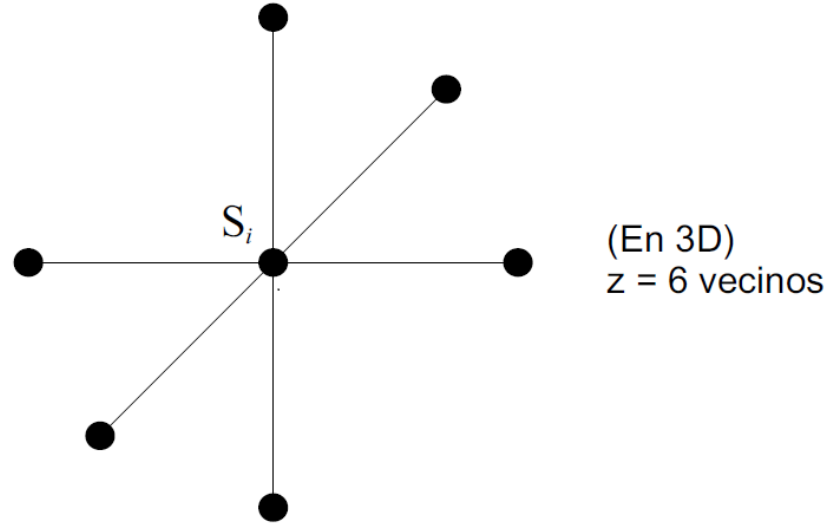


Figura 2.9: Espín S_i con seis vecinos.

2.4.5. Aproximación de Campo Medio para el Modelo de Ising

Debemos tomar en cuenta que cada espín interactúa con sus Z vecinos mas próximos, de esta manera, la energía de cada espín i es dada por:

$$E_i = -JS_i(S_i^{(1)} + S_i^{(2)} + \dots + S_i^{(Z)})$$

donde la suma es para los Z vecinos más próximos que rodean al espín i . La idea de la aproximación de campo medio es sustituir la suma:

$$S_i^{(1)} + S_i^{(2)} + S_i^{(3)} + \dots + S_i^{(Z)} \text{ por } Z \langle S_i \rangle,$$

donde $\langle S_i \rangle$ es el valor térmico medio de S_i . Se considera entonces que:

$$\langle S_i \rangle = \langle S_i^{(1)} \rangle = \langle S_i^{(2)} \rangle = \dots = \langle S_i^{(n)} \rangle.$$

Por lo tanto, la energía de cada espín i queda aproximada de la siguiente forma:

$$E_i = -JS_i(Z \langle S_i \rangle) \quad (2.113)$$

Entonces $h_{im} = Z \langle S_i \rangle$ representa un campo externo al espín i que sustituye a la interacción del espín i con sus primeros vecinos, por eso se llama aproximación de campo medio[43]. Por consiguiente, el Hamiltoniano total toma la siguiente forma:

$$\mathcal{H} = -JZ \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle S_i = \sum_{i=1}^N E_i \quad (2.114)$$

Es decir, en esta aproximación se ha independizado cada espín al sustituir sus interacciones por un campo medio, es como si ahora se tuviera un gas de espines sometidos

a un campo externo. Vamos ahora a calcular la temperatura crítica del modelo de Ising en esta aproximación, para eso tenemos que calcular el valor medio de cada espín $\langle S_i \rangle$, que es lo mismo que la magnetización por espín. Primero entonces se calcula la función de partición \mathcal{Z} :

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J Z \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle S_i} \\ &= \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\beta J Z \langle S_i \rangle S_i} = \prod_{i=1}^N \sum_{S_i=-1}^1 e^{\beta J Z \langle S_i \rangle S_i} \\ &= \prod_{i=1}^N (e^{\beta J Z \langle S_i \rangle} + e^{-\beta J Z \langle S_i \rangle}) = 2^N \cosh^N (\beta J Z \langle S_i \rangle)\end{aligned}\quad (2.115)$$

$$\mathcal{Z} = 2^N \cosh^N (\beta J Z \langle S_i \rangle) = \prod_{i=1}^N \mathcal{Z}_i \quad (2.116)$$

donde $\mathcal{Z}_i = 2 \cosh^N (\beta J Z \langle S_i \rangle)$

Ahora vamos a calcular la magnetización media por espín, es decir $\langle S_i \rangle$.

$$\langle S_i \rangle = \frac{\sum_{-1}^1 S_i e^{\beta J Z \langle S_i \rangle S_i}}{\mathcal{Z}_i} \quad (2.117)$$

$$\langle S_i \rangle = \frac{\sinh (\beta J Z \langle S_i \rangle)}{\cosh (\beta J Z \langle S_i \rangle)} \quad (2.118)$$

$$\langle S_i \rangle = \tanh (\beta J Z \langle S_i \rangle) \quad (2.119)$$

Entonces ahora tenemos una ecuación trascendental para calcular $\langle S_i \rangle$

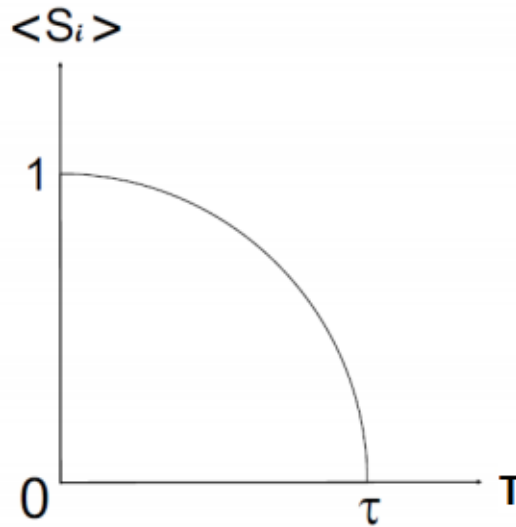


Figura 2.10: Gráfica de la variación del promedio térmico de S_i versus T .

Con esta ecuación vamos a calcular la temperatura crítica de transición ferromagnética-paramagnética, es decir cuando $\langle S_i \rangle$ pasa de un valor diferente de cero a cero. Tomemos en cuenta que si $\langle S_i \rangle \approx 0$ entonces $\tanh(\beta J \langle S_i \rangle Z) \approx \beta J Z \langle S_i \rangle$

$$\langle S_i \rangle \approx \beta J Z \langle S_i \rangle.$$

Por consiguiente $\beta J Z = 1$,

de esta manera $\beta = \frac{1}{JZ}$. Por lo tanto la temperatura crítica es:

$$T_c = \frac{JZ}{K_B}$$

Si hacemos $\frac{J}{K_B} = 1$, entonces $T_C = Z$.

Esto significa que la aproximación de campo medio predice una temperatura de transición igual a 2 para la red 1D, igual a 4 para la red cuadrada, igual a 6 para red cúbica.

Vamos a comparar eso con soluciones exactas y simulaciones.

En primer lugar en 1D no hay transición de fase ferromagnética-paramagnética, ya que cualquier cantidad de temperatura, por más pequeña que sea, destruye la fase ferromagnética. Entonces en 1D, $T_C = 0$, lo que significa que la aproximación de campo medio es muy mala en describir el comportamiento del modelo de Ising en 1D. En la red cuadrada la solución exacta de Onsager resulta en:

$$T_C = \frac{2}{\ln \sqrt{2} + 1} = 2.269.. \quad (2.120)$$

Comparando con la aproximación de campo medio $T_C = 4$, vemos que aunque la teoría de campo medio si predice transición, el valor de la T_C esta muy lejos del valor exacto. En la red cúbica no hay hasta el momento solución analítica exacta, sin embargo las simulaciones de Monte Carlo estiman $T_C \approx 4.52$, mientras que la aproximación de campo medio resulta $T_C = 6$. No obstante notamos que a medida que la dimensión de la red crece la aproximación de campo medio aproxima mejor el valor de T_C . Por ejemplo, en la red hipercúbica 4D, con Monte Carlo se estima $T_C \approx 6.68$, mientras que con campo medio da $T_C = 8$. Vamos a demostrar que en dimensión infinita la aproximación de campo medio calcula el valor exacto de T_C .

Vamos ahora a considerar la situación en que todos los espines del sistema interactúan igualmente con un acoplamiento J . Esto significa que cada espín interactúa con todos los otros espines con la misma interacción J . De esta forma el Hamiltoniano del sistema es el siguiente:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{ij} S_i S_j = -\frac{1}{2} J \left[\left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 - \sum_{i=1}^N S_i^2 \right] \quad (2.121)$$

donde la substracción del sistema del término $\sum_{i=1}^N S_i^2$ evita que cada espín interactúe consigo mismo.

Entonces:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.122)$$

Sin embargo: $\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N S_i^2 = \frac{JN}{2}$ ya que $S_i^2 = 1$. De esta manera tenemos que:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + \frac{JN}{2} \quad (2.123)$$

Donde $\frac{JN}{2}$ es una constante y ya que JN no es relevante para calcular la magnetización o para calcular la temperatura crítica podemos expresar el Hamiltoniano del sistema simplemente como:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 \quad (2.124)$$

Notese que si todos los espines estuvieran paralelos, la energía del Hamiltoniano sería $E = -\frac{J}{2}N^2$, lo cual hace que la energía total no sea una cantidad extensiva; la física estadística se sustenta en la extensividad de sus funciones de estado, entonces lo que se hace es hacer $J = \frac{J}{N}$ para imponer la extensividad. Por lo tanto el Hamiltoniano queda expresado de la siguiente manera:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 \quad (2.125)$$

Ahora vamos a calcular la temperatura crítica de este sistema Ising donde cada espín interactúa con todos los otros con la misma interacción $\frac{J}{N}$. Calculemos primero la función de partición.

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} e^{\frac{\beta J}{2N} (\sum_{i=1}^N S_i)^2} \quad (2.126)$$

Para esto vamos a usar la transformación de Hubbard-Stratonovich a fin de desacoplar los espines de la exponencial. La transformación de Hubbard-Stratonovich se basa en la siguiente integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = \sqrt{2\pi}\sigma \quad (2.127)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-x^2}{2\sigma^2} + \frac{x_0 x}{\sigma^2} - \frac{x_0^2}{2\sigma^2}} dx = \sqrt{2\pi}\sigma \quad (2.128)$$

Entonces:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2} + \frac{x_0 x}{\sigma^2}} dx = e^{\frac{x_0^2}{2\sigma^2}} \quad (2.129)$$

De esta manera:

$$e^{\frac{\beta J}{2N} (\sum_{i=1}^N S_i)^2} = \sqrt{\frac{\beta J}{2\pi N}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\beta J x^2}{2N} + \frac{\beta J}{N} (\sum_{i=1}^N S_i) x} dx \quad (2.130)$$

Así tenemos:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} \sqrt{\frac{\beta J}{2\pi N}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-\beta J x^2}{2N} + \frac{\beta J}{N} (\sum_{i=1}^N S_i) x} dx \quad (2.131)$$

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{\beta J}{2\pi N}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta J x^2}{2N}} \sum_{\{S_i\}} e^{\frac{\beta J}{N} (\sum_{i=1}^N S_i) x} dx \quad (2.132)$$

$$\sum_{\{S_i\}} e^{\frac{x\beta J}{N} (\sum_{i=1}^N S_i)} = \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\frac{x\beta J}{N} S_i} \quad (2.133)$$

$$\sum_{\{S_i\}} e^{\frac{x\beta J}{N} (\sum_{i=1}^N S_i)} = \prod_{i=1}^N \sum_{S_i=-1}^1 e^{\frac{x\beta J}{N} S_i} \quad (2.134)$$

$$\sum_{\{S_i\}} e^{\frac{x\beta J}{N} (\sum_{i=1}^N S_i)} = (e^{\frac{x\beta J}{N}} + e^{-\frac{x\beta J}{N}})^N \quad (2.135)$$

$$\sum_{\{S_i\}} e^{\frac{x\beta J}{N} (\sum_{i=1}^N S_i)} = 2^N \cosh^N \left(\frac{x\beta J}{N} \right) \quad (2.136)$$

$$\Rightarrow \mathcal{Z} = \sqrt{\frac{x\beta J}{2\pi N}} 2^N \cosh^N \left(\frac{x\beta J}{N} \right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta J x^2}{2N}} 2^N \cosh^N \frac{x\beta J}{N} dx \quad (2.137)$$

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{\beta J}{2\pi N}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta J x^2}{2N} + N \ln (2 \cosh \frac{x\beta J}{N})} dx \quad (2.138)$$

Por conveniencia vamos a hacer el siguiente cambio de variable $x = Ny$, entonces:

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{\beta J}{2\pi N}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta J y^2}{2N} + N \ln (2 \cosh \frac{\beta J y}{N})} dy \quad (2.139)$$

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{\beta J}{2\pi N}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\beta f(y)} dy \quad (2.140)$$

donde: $f(y) = \frac{Jy^2}{2} - \frac{1}{\beta} \ln 2 \cosh \beta J y$

En el equilibrio esta función $f(y)$ debe ser un mínimo. En ese caso la primera derivada respecto a y debe ser cero, y la segunda derivada mayor que cero. Para calcular $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\beta f(y)} dy$ vamos a expandir $f(y)$ alrededor de su valor de equilibrio $y = y_o$.

$$f(y) = f(y_o) + f'(y_o)(y - y_o) + f''(y_o)(y - y_o)^2 + \dots + .. \quad (2.141)$$

$$f(y) \approx f(y_o) + f''(y_o)(y - y_o)^2 \quad (2.142)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\beta f(y)} dy = e^{-N\beta f(y_o)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\beta f''(y_o)(y-y_o)^2} dy \quad (2.143)$$

La integral $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\beta f''(y_o)(y-y_o)^2} dy$ es una integral gaussiana. Entonces:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\beta f''(y_o)(y-y_o)^2} dy = \sqrt{\frac{N\beta f''(y_o)}{2\pi}}$$

De esta manera tenemos que:

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} e^{-N\beta f(y_o)} \sqrt{\frac{N\beta f''(y_o)}{2\pi}} \quad (2.144)$$

$$\mathcal{Z} = \frac{\beta N}{2\pi} \sqrt{J} e^{-N\beta f(y_o)} \quad (2.145)$$

Vamos ahora a tomar el logaritmo de \mathcal{Z} :

$$\ln \mathcal{Z} = -N\beta f(y_o) + \ln\left(\frac{\beta N \sqrt{J}}{2\pi}\right) \quad (2.146)$$

Esto sirve para calcular la densidad de energía libre

$$-\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{K_B T \ln \mathcal{Z}}{N} = f(y_o) - \frac{K_B T}{N} \ln\left(\frac{\beta \sqrt{J} N}{2\pi}\right) \quad (2.147)$$

$$\Rightarrow f(y_o) = -\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{K_B T \ln \mathcal{Z}}{N} \quad (2.148)$$

Entonces la función:

$$f(y) = \frac{Jy^2}{2} - \frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh (\beta J y)] \quad (2.149)$$

representa la densidad de energía libre cuando $y = y_o$ minimiza $f(y)$. Por consiguiente el equilibrio se define al igualar $\frac{\partial f}{\partial y} = 0$, entonces

$$Jy - J \tanh (\beta J y) = 0 \quad (2.150)$$

$$y = \tanh (\beta J y) \quad (2.151)$$

$$\Rightarrow y_o = \tanh (\beta J y_o) \quad (2.152)$$

Aquí se ve que tenemos la misma ecuación a la que se llegó con la aproximación de campo (ver ecuación 2.119), con esto vemos que podemos comparar al reestablecer $J = NJ$ para la aproximación de campo medio $\langle S_i \rangle = \tanh (\beta J Z \langle S_i \rangle)$. Para una red de dimensión infinita $y_o = \tanh (N\beta J y_o)$

Entonces $y_o = \langle S_i \rangle$ y $Z = N$ donde $N \rightarrow \infty$.

Tenemos $T_C = \frac{NJ}{K_B}$ y haciendo $\frac{J}{K_B} = 1 \rightarrow T_C = N$.

Con esto hemos demostrado que en una red de N espines que tiende a infinito ($N \rightarrow \infty$), si todos los espines interactúan igual con interacción J , entonces la aproximación de campo medio es exacta. Si el número de primeros vecinos es igual al número de espines de la red, es porque estamos en dimensión infinita ya que $N - 1 \approx N$ si $N \rightarrow \infty$.

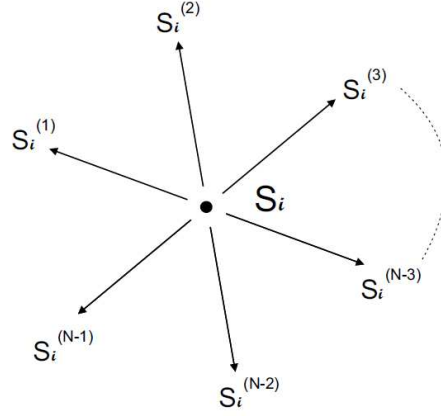


Figura 2.11: Sistema de espines de dimensión infinita.

Esto indica que la aproximación de campo medio equivale a tener el sistema de espines en dimensión infinita, por eso en bajas dimensiones la aproximación de campo medio no es buena, pero, hay una razón más de porqué no es adecuada en bajas dimensiones. Para entender esto vamos a expresar cada variable de espín de la siguiente manera:

$$S_i = \langle S_i \rangle + (S_i - \langle S_i \rangle) \quad (2.153)$$

donde el primer sumando es el promedio térmico y el segundo es la fluctuación alrededor del valor medio térmico. Hasta aquí no se ha hecho ninguna aproximación. Ahora:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{ij}^N S_i S_j \quad (2.154)$$

$$\mathcal{H} = -J \sum_{ij}^N [\langle S_i \rangle + (S_i - \langle S_i \rangle)] [\langle S_j \rangle + (S_j - \langle S_j \rangle)] \quad (2.155)$$

Notemos que:

$$\begin{aligned} & [\langle S_i \rangle + (S_i - \langle S_i \rangle)] [\langle S_j \rangle + (S_j - \langle S_j \rangle)] \\ &= \langle S_i \rangle S_j + \langle S_j \rangle S_i - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + (S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle) \\ &= \langle S_i \rangle S_j + \langle S_j \rangle S_i - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + (S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle) \end{aligned} \quad (2.156)$$

Ahora, si consideramos que las fluctuaciones son despreciables, es decir $S_i - \langle S_i \rangle = 0$ y $S_j - \langle S_j \rangle = 0$ tendremos:

$$\begin{aligned} & \Rightarrow [\langle S_i \rangle + (S_i - \langle S_i \rangle)] [\langle S_j \rangle + (S_j - \langle S_j \rangle)] \\ & \approx \langle S_i \rangle S_j + \langle S_j \rangle S_i - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \end{aligned} \quad (2.157)$$

Entonces:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} &= -J \sum_{ij} S_i S_j = -J \sum_{ij} \langle S_i \rangle S_j - J \sum_{ij} \langle S_j \rangle S_i + J \sum_{ij} \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \\
 &= -J \sum_{ij} \langle S_i \rangle (S_j - \langle S_j \rangle) - J \sum_{ij} \langle S_i \rangle S_i \\
 &= -J \sum_{ij} \langle S_i \rangle S_i \quad (2.158)
 \end{aligned}$$

Este Hamiltoniano es equivalente al de la aproximación de campo medio, entonces, la aproximación de campo medio no considera las fluctuaciones de cada espín en relación a su valor medio, sin embargo las fluctuaciones de la magnetización alrededor de su valor medio son relevantes especialmente en bajas dimensiones cuando la temperatura se aproxima a T_C , cuando $T = T_C$ las fluctuaciones son mayores, especialmente en bajas dimensiones, por eso la aproximación de campo medio no describe bien la criticalidad de bajas dimensiones.

Por otro lado, en altas dimensiones las fluctuaciones son despreciables, y es ahí donde la aproximación de campo medio es buena.

Mediante resultados obtenidos por una simulación de Monte Carlo es posible visualizar lo descrito, esto es, como se comporta la magnetización por espín $m = \sum_{i=1}^N \frac{S_i}{N}$ en función del tiempo o del número de pasos de Monte Carlo para una red cuadrada.

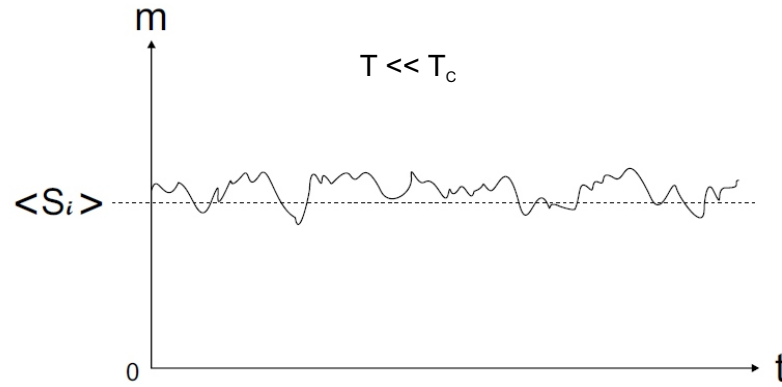


Figura 2.12: Gráfica Magnetización versus tiempo(pasos Montecarlo). Aquí se muestra la variación del promedio térmico de S_i para valores alejados de T_C .

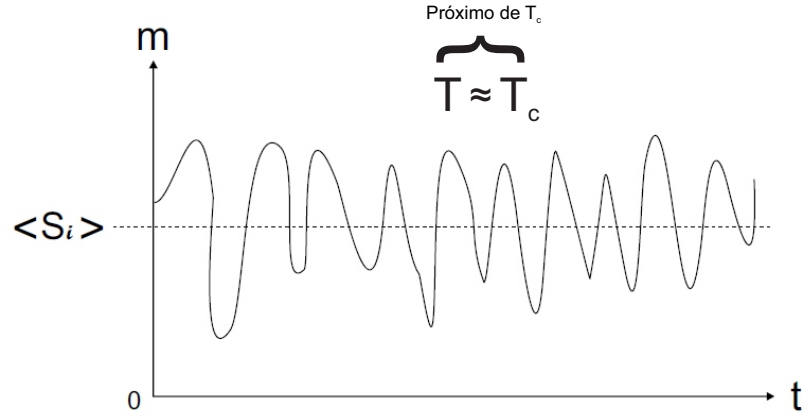


Figura 2.13: Gráfica Magnetización versus tiempo(pasos Montecarlo). Aquí se muestra la variación del promedio térmico de S_i para valores próximos a T_C .

Las fluctuaciones son mucho mayores cuando $T \approx T_C$.

2.5. Modelo Blume Capel de espín 5/2 con interacciones competitivas

En esta sección se planteará el Hamiltoniano a usar en este trabajo.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3$$

Donde \mathcal{H}_1 viene representado por:

$$\mathcal{H}_1 = -J \sum_{\{i,j\}} S_i S_j$$

que representa el aporte ferromagnético.

\mathcal{H}_2 viene representado por:

$$\mathcal{H}_2 = K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1}$$

que en el marco del modelo de Blume Capel representa el aporte antiferromagnético con interacción a primeros vecinos siendo K el factor de interacción.

Y \mathcal{H}_3 viene representado por:

$$\mathcal{H}_3 = D \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.159)$$

que representa el aporte del campo cristalino.

En cuanto a \mathcal{H}_1 podemos hacer la siguiente transformación:

$$\mathcal{H}_1 = -J \sum_{\{i,j\}} S_i S_j = -\frac{J}{2} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 - \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.160)$$

En el límite termodinámico este Hamiltoniano queda expresado de la siguiente manera:

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 - \frac{J}{2N} \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.161)$$

Tenemos entonces:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 \quad (2.162)$$

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 - \frac{J}{2N} \sum_{i=1}^N S_i^2 + K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + D \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.163)$$

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \left(D - \frac{J}{2N} \right) \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.164)$$

El término de $J/2N$ queda absorbido por la anisotropía D y por tanto en el marco del modelo de Blume-Capel propuesto en esta tesis el Hamiltoniano queda finalmente expresado de la siguiente manera:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + D \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (2.165)$$

donde el espín S_i puede tomar valores que van desde:

$-5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2$.

donde el primer sumando contiene todos los pares de espines acoplados por la constante J obtenida con la aproximación de campo medio y que brinda el aporte ferromagnético para $J > 0$. El segundo sumando tiene que ver con la interacción a primeros vecinos y escogemos un valor $K > 0$ que brinda el aporte antiferromagnético y que originará la competencia de interacciones como fue planteado en el modelo de Nagle-Kardar[25, 26, 27], el tercer término como vimos anteriormente tiene que ver con el aporte de la anisotropía según los modelos de Blume Capel[10, 11, 13] con constante D ; es así como se producirá la competición entre los términos que hacen los aportes ferromagnético y antiferromagnético.

La metodología que será empleada para estudiar el comportamiento crítico del modelo de Blume Capel de espín 5/2 con interacciones competitivas de corto y de largo alcance consiste en realizar procedimientos analíticos y de cálculo numérico.

El primer paso es la obtención de una expresión analítica de la energía libre de Helmholtz debido a que será la herramienta fundamental con la que se podrán determinar las fases magnéticas en equilibrio termodinámico[44, 45]. Las regiones de validez de estas fases serán mostradas en un diagrama bidimensional cuyo eje vertical es la

temperatura y el eje horizontal es la anisotropía. Se obtendrán diferentes diagramas de fase para observar la evolución de su topología con la constante de acoplamiento de corto alcance. Se requieren dos procedimientos analíticos para conseguir la expresión de la energía libre, cuya dificultad radica mayormente en el cálculo de la función de partición.

Para determinar la función de partición, primero se aplica la transformación de Hubbard-Stratonovich(ver apéndice B) a fin de desacoplar las interacciones de largo alcance(de dimensión infinita) y reducir el término que las contiene a un problema de un solo cuerpo(un solo espín) afectado por un campo medio proporcional a las interacciones de largo alcance que le afectan. En consecuencia, se simplifica el problema de muchos cuerpos y de esta manera es mas simple aplicar el método del punto de silla y así finalizar la expresión de la función de partición aplicando el logaritmo de ésta para obtener la energía libre. Sin embargo, las interacciones de corto alcance son unidimensionales(con sus dos vecinos mas proximos), y por esta razón es necesario utilizar la técnica de la matriz de transferencia con el objetivo de calcular la contribución de la cadena lineal de interacciones de corto alcance a la función de partición. El mayor autovalor de la matriz de transferencia es lo que interesa de esta contribución, por consiguiente, la expresión de la energía libre será explícitamente analítica con excepción del autovalor máximo de la matriz, ya que ésta es de 6×6 y su máximo autovalor requiere ser obtenido por un algoritmo numérico que en el caso de este trabajo será el “Metodo de potencia”.

Cabe mencionar que el sistema de espines modelado por el correspondiente Hamiltoniano está en contacto con un baño térmico a una determinada temperatura, desde el punto de vista de la Física Estadística esto clasifica al sistema como una colectividad canónica(o ensamble canónico), donde el sistema alcanza el equilibrio termodinámico al minimizar la energía libre de Helmholtz, por lo tanto, la determinación de este potencial termodinámico, en especial, su densidad f en función de la magnetización es útil, no solo para conocer el valor de la magnetización que la minimiza sino tambien la naturaleza de las líneas de frontera que dividen las fases magnéticas descritas por la magnetización. Estas líneas de frontera contienen puntos donde ocurren transiciones de fase que pueden ser de primer y segundo orden. En consecuencia para este trabajo fue necesario implementar un algoritmo computacional que, con la ayuda de la energía libre, busque las líneas de frontera y reporte si son de primer y segundo orden. Los puntos que forman una frontera de primer orden se determinan cuando la energía libre se minimiza para más de un valor de la magnetización, y en los puntos de transición de segundo orden, la magnetización cae a cero de manera continua. La magnetización se obtiene también a partir de la energía libre en los puntos que la minimiza.

Para comenzar el estudio del presente modelo a temperatura finita ($T > 0$) empezamos determinado la función de partición \mathcal{Z} considerando el sistema como un ensamble canónico[34] a partir del Hamiltoniano del sistema.

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \frac{D}{2} \sum_{i=1}^N (S_i^2 + S_{i+1}^2) \quad (2.166)$$

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (2.167)$$

donde $\beta = \frac{1}{K_B T}$ y T es la temperatura absoluta.

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} e^{\frac{\beta J}{2N} (\sum_{i=1}^N S_i)^2} \prod_{i=1}^N e^{-\beta K S_i S_{i+1} - \frac{\beta D}{2} (S_i^2 + S_{i+1}^2)} \quad (2.168)$$

Haciendo uso de la transformación de Hubbard Stratonovich es posible reformular la expresión anterior y linealizar el sistema de espines acoplados.

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-\frac{1}{2}\beta N J y^2} \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\frac{1}{2}J y \beta (S_i + S_{i+1}) - K\beta S_i S_{i+1} - \frac{\beta D}{2} (S_i^2 + S_{i+1}^2)} \right] dy \quad (2.169)$$

Usando la técnica de la matriz de transferencia obtenemos:

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-\frac{1}{2}\beta N J y^2} \text{Tr} \{W^N\} \right] dy \quad (2.170)$$

y $\text{Tr} \{W^N\}$ es la traza de la matriz de transferencia.

Ahora se puede hacer el cambio:

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-\frac{1}{2}\beta N J y^2} e^{\ln \text{Tr} \{W^N\}} \right] dy \quad (2.171)$$

con

$$\text{Tr} \{W^N\} = \sum_{i=-5/2}^{5/2} \langle s_i | W^N | s_i \rangle = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N + \lambda_4^N + \lambda_5^N + \lambda_6^N \quad (2.172)$$

donde λ_i representa el autovalor i -ésimo de la matriz de transferencia W . Haciendo uso de la aproximación punto de silla explicado en el apéndice C se obtiene:

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{J}{g''(y_o)}} e^{-N\beta g(y_o)} \quad (2.173)$$

con

$$g(y_o) = \frac{1}{2} J y_o^2 - \frac{1}{\beta} \ln \lambda_1$$

Obteniendo finalmente así la densidad energía libre de la siguiente forma(ver apéndice C):

$$f(y_o) = \frac{1}{2} J y_o^2 - \frac{1}{\beta} \ln \lambda_1 \quad (2.174)$$

donde λ_1 es el mayor autovalor de la matriz de transferencia. Ahora y_o es un parámetro que minimiza la energía libre y el parámetro que minimiza la energía libre es justamente la magnetización(en el apéndice D se da una demostración para el modelo de Ising con espín 5/2 que muestra que $y_o = m$). Tenemos así:

$$f(m) = \frac{1}{2} J m^2 - \frac{1}{\beta} \ln \lambda_1 \quad (2.175)$$

Cada término de la matriz es obtenido de la ecuación 2.166 de la expresión:

$$e^{\frac{1}{2}Jy\beta(S_i+S_j)-K\beta S_i S_j - \frac{\beta D}{2}(S_i^2+S_j^2)}$$

donde los S_i y S_j toman los seis valores de espín posibles, $-5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ y $5/2$. Así la matriz de transferencia tiene la siguiente forma:

$$W = \begin{bmatrix} e^{\beta(-\frac{5}{2}m-\frac{25}{4}K-\frac{25}{4}D)} & e^{\beta(-2m-\frac{15}{4}K-\frac{17}{4}D)} & e^{\beta(-\frac{3}{2}m-\frac{5}{4}K-\frac{13}{4}D)} & e^{\beta(-m+\frac{5}{4}K-\frac{13}{4}D)} & e^{\beta(-\frac{1}{2}m-\frac{15}{4}K-\frac{17}{4}D)} & e^{\beta(\frac{25}{4}K-\frac{25}{4}D)} \\ e^{\beta(-2m-\frac{15}{4}K-\frac{17}{4}D)} & e^{\beta(-\frac{3}{2}m-\frac{9}{4}K-\frac{9}{4}D)} & e^{\beta(-m-\frac{3}{4}K-\frac{5}{4}D)} & e^{\beta(-\frac{1}{2}m+\frac{3}{4}K-\frac{5}{4}D)} & e^{\beta(\frac{9}{4}K-\frac{9}{4}D)} & e^{\beta(\frac{1}{2}m+\frac{15}{4}K-\frac{17}{4}D)} \\ e^{\beta(-\frac{3}{2}m-\frac{5}{4}K-\frac{13}{4}D)} & e^{\beta(-m-\frac{3}{4}K-\frac{5}{4}D)} & e^{\beta(-\frac{1}{2}m-\frac{1}{4}K-\frac{1}{4}D)} & e^{\beta(\frac{1}{4}K-\frac{1}{4}D)} & e^{\beta(\frac{1}{2}m+\frac{3}{4}K-\frac{5}{4}D)} & e^{\beta(m+\frac{5}{4}K-\frac{13}{4}D)} \\ e^{\beta(-m+\frac{5}{4}K-\frac{13}{4}D)} & e^{\beta(-\frac{1}{2}m+\frac{3}{4}K-\frac{5}{4}D)} & e^{\beta(\frac{1}{4}K-\frac{1}{4}D)} & e^{\beta(\frac{1}{2}m-\frac{1}{4}K-\frac{1}{4}D)} & e^{\beta(m-\frac{3}{4}K-\frac{5}{4}D)} & e^{\beta(\frac{3}{2}m-\frac{5}{4}K-\frac{13}{4}D)} \\ e^{\beta(-\frac{1}{2}m-\frac{15}{4}K-\frac{17}{4}D)} & e^{\beta(\frac{9}{4}K-\frac{9}{4}D)} & e^{\beta(\frac{1}{2}m+\frac{3}{4}K-\frac{5}{4}D)} & e^{\beta(m-\frac{3}{4}K-\frac{5}{4}D)} & e^{\beta(\frac{3}{2}m-\frac{9}{4}K-\frac{9}{4}D)} & e^{\beta(2m-\frac{15}{4}K-\frac{17}{4}D)} \\ e^{\beta(\frac{25}{4}K-\frac{25}{4}D)} & e^{\beta(\frac{1}{2}m+\frac{15}{4}K-\frac{17}{4}D)} & e^{\beta(m+\frac{5}{4}K-\frac{13}{4}D)} & e^{\beta(\frac{3}{2}m-\frac{5}{4}K-\frac{13}{4}D)} & e^{\beta(2m-\frac{15}{4}K-\frac{17}{4}D)} & e^{\beta(\frac{5}{2}m-\frac{25}{4}K-\frac{25}{4}D)} \end{bmatrix}$$

Tenemos así la función densidad de energía libre en función de m , en general $f = f(m, K, D, T)$. Notar que λ_1 (el mayor autovalor de la matriz de transferencia) depende de K , D y m . El método de matriz de transferencia es muy usado en la física estadística, por ejemplo, para estudiar la denominada en ingles "magnetization plateaux" que es un tema de estudio que tiene que ver con sistemas de espines cuánticos[44].

El análisis de esta función permitió obtener las curvas de magnetización y por lo tanto las curvas de transición de fase y así poder entender la física de este sistema.

Capítulo 3

Resultados y discusión

Ahora a continuación se presentaran los resultados obtenidos en este trabajo. Hay dos relaciones importantes obtenidas en el capitulo anterior y de cuyo análisis se obtuvieron los resultados. Primero, la expresión del Hamiltoniano del sistema en estudio expresado en la ecuación 2.165 que nos servirá para estudiar el sistema a $T = 0$:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N}(\sum_{i=1}^N S_i)^2 + K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + D \sum_{i=1}^N S_i^2$$

y segundo, la expresión de la energía libre f para estudiar al sistema a $T > 0$ de la ecuacion 2.175:

$$f(m) = \frac{1}{2} J m^2 - \frac{1}{\beta} \ln \lambda_1$$

Se presentarán las configuraciones de espines que minimizan la energía del sistema para $T = 0$, las fases que existen a esta temperatura y además se mostrará el diagrama de fases del sistema para $T = 0$. Estos resultados fueron obtenidos realizando un análisis del Hamiltoniano del sistema. Luego se mostrarán los resultados para $T > 0$, se mostrarán las curvas de magnetización para valores particulares del parámetro K , las curvas de energía libre del sistema y los diagramas de fases mas interesantes de este sistema. Todo ello fue obtenido realizando un análisis computacional de la función energía libre f .

Debido a la competición entre interacciones ferromagnéticas y antiferromagnéticas el sistema de estudio muestra comportamientos muy interesantes. En este trabajo producto del analisis de los diagramas de fase obtenidos, se han encontrado puntos tricríticos, los que señalan el encuentro de una frontera continua con una transición de primer orden; puntos críticos ordenados, que nos señalan un punto crítico aislado donde termina una linea de primer orden que separa dos fases ordenadas distintas; puntos triples, que señalan el encuentro de tres fronteras críticas de primer orden; y puntos multicríticos que nos señala el encuentro de varias fronteras de primer orden[46]. Lo primero es obtener las fases que conviven en el nivel basal, esto es a temperatura cero, para ello se partira del hamiltoniano del sistema pues como se sabe para $T = 0$ un sistema minimiza su energía.

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N}(\sum_{i=1}^N S_i)^2 + K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + D \sum_{i=1}^N S_i^2$$

La densidad de energía por espín se obtiene esta ecuación, la cual debe ser minimizada para valores de K y D . Por inspección es posible encontrar de manera intuitiva que ordenamientos son aquellos que producen la menor energía a temperatura cero, se debe notar que para sistemas mucho mas complicados encontrar esos ordenamientos no es tan simple y requiere de algoritmos como los algoritmos genéticos que minimizan la energía como en el caso de los vidrios de espín[47] y otros casos mas[48, 49, 50]. Para este sistema en estudio expresado mediante el Hamiltoniano anterior se han encontrado 12 fases que pueden aparecer a $T = 0$. Existen seis fases ferromagnéticas a los que designaremos con F_1, F_2, F_3, F_4, F_5 y F_6 y seis fases antiferromagnéticas designadas como $AF_1, AF_2, AF_3, AF_4, AF_5$ y AF_6 .

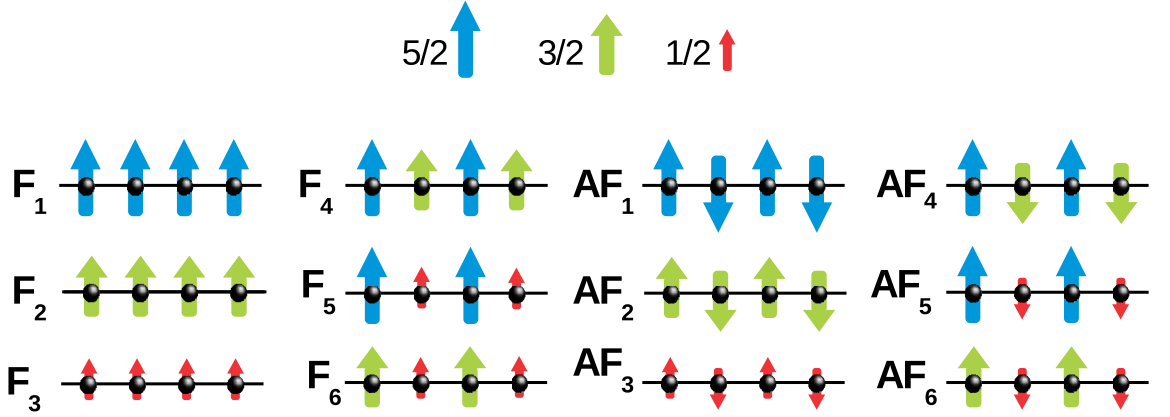


Figura 3.1: Configuración de espines en $T = 0$ que minimizan el Hamiltoniano del sistema.

En la figura 3.1 se observan los ordenamientos encontrados que minimizan la energía del sistema para $T = 0$, esto es, las fases del sistema.

$$e_{F_1} = \frac{E_{F_1}}{(NJ)} = -\frac{25}{8} + \frac{25}{4}K + \frac{25}{4}D \quad (3.1)$$

$$e_{F_2} = \frac{E_{F_2}}{(NJ)} = -\frac{9}{8} + \frac{9}{4}K + \frac{9}{4}D \quad (3.2)$$

$$e_{F_3} = \frac{E_{F_3}}{(NJ)} = -\frac{1}{8} + \frac{1}{4}K + \frac{1}{4}D \quad (3.3)$$

$$e_{F_4} = \frac{E_{F_4}}{(NJ)} = -2 + \frac{5}{4}K + \frac{15}{4}D \quad (3.4)$$

$$e_{F_5} = \frac{E_{F_5}}{(NJ)} = -\frac{9}{8} + \frac{5}{4}K + \frac{13}{4}D \quad (3.5)$$

$$e_{F_6} = \frac{E_{F_6}}{(NJ)} = -\frac{1}{2} + \frac{3}{4}K + \frac{5}{4}D \quad (3.6)$$

$$e_{AF_1} = \frac{E_{AF_1}}{(NJ)} = -\frac{25}{4}K + \frac{25}{4}D \quad (3.7)$$

$$e_{AF_2} = \frac{E_{AF_2}}{(NJ)} = -\frac{9}{4}K + \frac{9}{4}D \quad (3.8)$$

$$e_{AF_3} = \frac{E_{AF_3}}{(NJ)} = -\frac{1}{4}K + \frac{1}{4}D \quad (3.9)$$

$$e_{AF_4} = \frac{E_{AF_4}}{(NJ)} = -\frac{1}{8} - \frac{15}{4}K + \frac{17}{4}D \quad (3.10)$$

$$e_{AF_5} = \frac{E_{AF_5}}{(NJ)} = -\frac{1}{2} - \frac{5}{4}K + \frac{13}{4}D \quad (3.11)$$

$$e_{AF_6} = \frac{E_{AF_6}}{(NJ)} = -\frac{1}{8} - \frac{3}{4}K + \frac{5}{4}D \quad (3.12)$$

Notar que las ecuaciones 3.1 a 3.12 han sido obtenidas usando las configuraciones encontradas mostradas en la figura 3.1 y reemplazando cada configuración en la ecuación del Hamiltoniano del sistema (ecuación 2.165), además cada ecuación está dividida por el término NJ haciendo $J = 1$, lo cual nos da cantidades adimensionales, recordar que los parámetros K , D y J tienen unidades de energía. Estas ecuaciones representan las densidades de energía para cada fase encontrada.

Fase	Densidad de energía	Magnetización
F_1	$-\frac{25}{8} + \frac{25}{4}K + \frac{25}{4}D$	$\frac{5}{2}$
F_2	$-\frac{9}{8} + \frac{9}{4}K + \frac{9}{4}D$	$\frac{3}{2}$
F_3	$-\frac{1}{8} + \frac{1}{4}K + \frac{1}{4}D$	$\frac{1}{2}$
F_4	$-2 + \frac{15}{4}K + \frac{17}{4}D$	2
F_5	$-\frac{9}{8} + \frac{5}{4}K + \frac{13}{4}D$	$\frac{3}{2}$
F_6	$-\frac{1}{2} + \frac{3}{4}K + \frac{5}{4}D$	1
AF_1	$-\frac{25}{4}K + \frac{25}{4}D$	0
AF_2	$-\frac{9}{4}K + \frac{9}{4}D$	0
AF_3	$-\frac{1}{4}K + \frac{1}{4}D$	0
AF_4	$-\frac{1}{8} - \frac{15}{4}K + \frac{17}{4}D$	$\frac{1}{2}$
AF_5	$-\frac{1}{2} - \frac{5}{4}K + \frac{13}{4}D$	1
AF_6	$-\frac{1}{8} - \frac{3}{4}K + \frac{5}{4}D$	$\frac{1}{2}$

Cuadro 3.1: Tabla que muestra la densidad de energía para cada fase y su magnetización respectiva

En la tabla 3.1 se muestra las fases que aparecen en el estado básico a $T = 0$ con sus respectivas densidades de energía en unidades J con su correspondiente valor de

magnetización m , notar que aquí la magnetización es la suma de todos los espines por unidad de espín. Los valores de estas energías son mínimos globales de la densidad de energía para el Hamiltoniano del sistema en función de los valores de las constantes K y D . Si observamos en detalle la tabla nos daremos cuenta que existen dos fases ferromagnéticas que a pesar de tener configuración diferente tienen la misma magnetización promedio, esto es, las fases $F2$ y $F5$ con $m = 3/2$.

Conociendo la forma de la energías para cada fase ahora se busca aquellas fases que sean mínimas para cada par de valores K y D para así construir las gráficas de fronteras de coexistencia de las fases del sistema a $T = 0$. En las siguientes gráficas se mostrará cómo se realiza el procedimiento de búsqueda de estas fronteras y se vera la existencia de un punto multicrítico a $T = 0$ donde coexisten todas las fases, tanto las ferromagnéticas como las antiferromagnéticas.

De aquí en adelante para la construccion de las gráficas siempre los parámetros serán cosiderados adimensionales haciendo la división K/J , D/J , f/J , e/J y K_B/J donde K_B es la constante de Boltzman y J se considera 1.

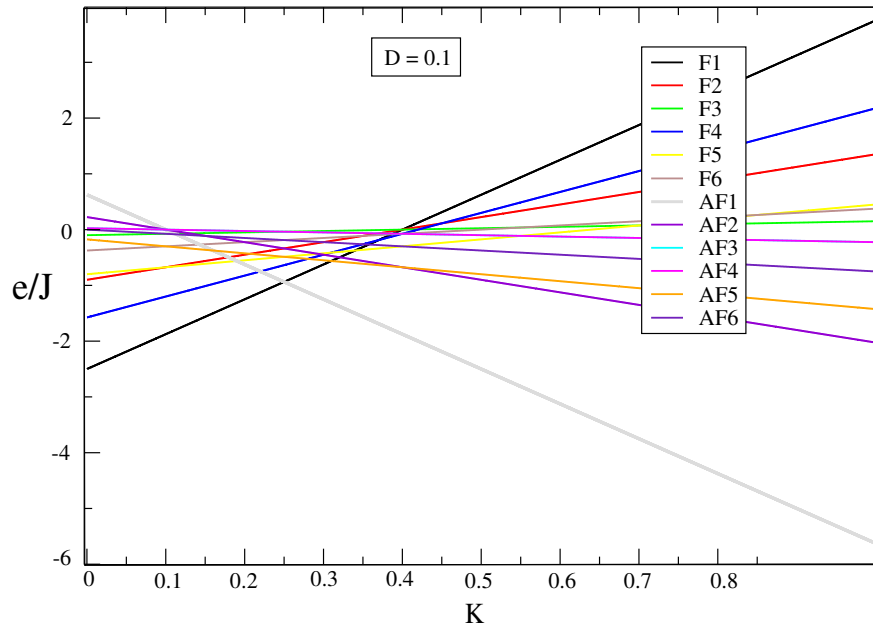


Figura 3.2: Gráfica energía versus K para $D = 0.1$ y $T = 0$.

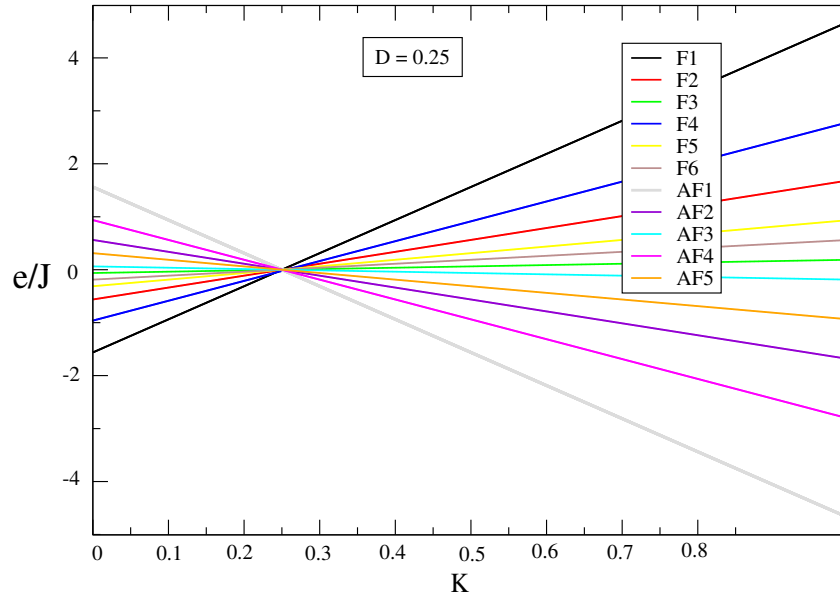


Figura 3.3: Gráfica energía versus K para $D = 0.25$ y $T = 0$ donde se muestra la existencia de un punto multicrítico.

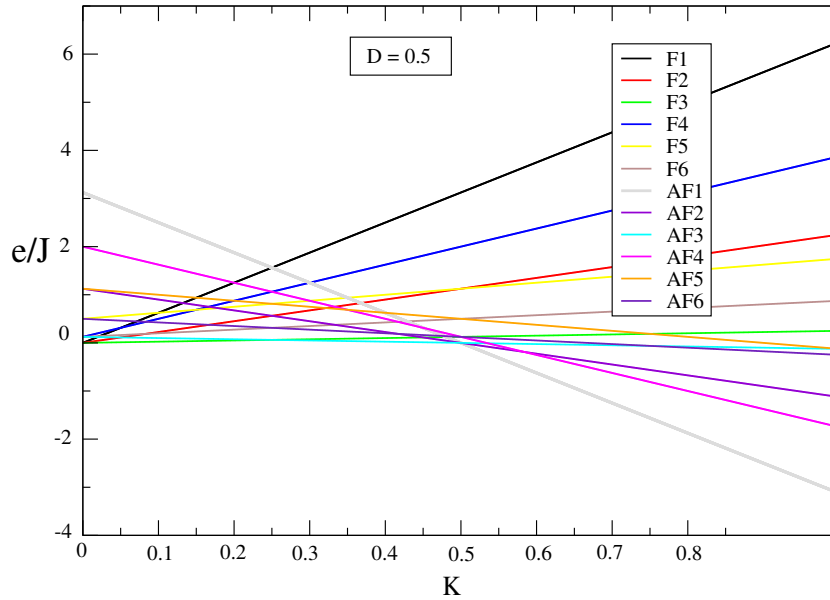


Figura 3.4: Gráfica energía versus K para $D = 0.5$ y $T = 0$.

Una muestra del procedimiento a seguir se da en las gráficas de las figuras 3.2, 3.3 y 3.4, en ellas se muestra la evolución de las energías a medida que varían los valores

de K y D . Bajo esta idea se construye un algoritmo que busque los valores de D y K para los cuales la energía sea mínima. Estos resultados se muestran en la gráfica 3.5.

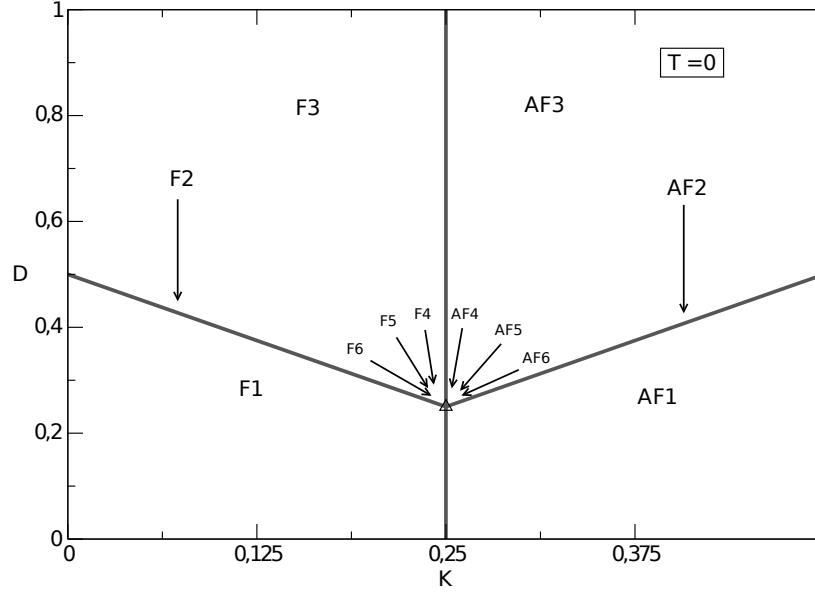


Figura 3.5: Gráfica del diagrama de fases para el modelo a $T = 0$. El triángulo representa el punto multicrítico.

Aquí en la figura 3.5 se observa que las fases ferromagnéticas solo existen hasta el valor de $D = 0.25$, luego ese punto $(K, D) = (0.25, 0.25)$ es un punto multicrítico donde aparecen todas las fases F y AF . A partir de ese valor existen algunas fases AF . Es importante hacer notar que, las fases AF solo existen para $T = 0$ eso lo podemos afirmar debido a que se está estudiando un modelo de Ising cuyo aporte AF viene dado por una cadena lineal y es bien sabido que no existe magnetización espontánea para un modelo de Ising en $1D$.

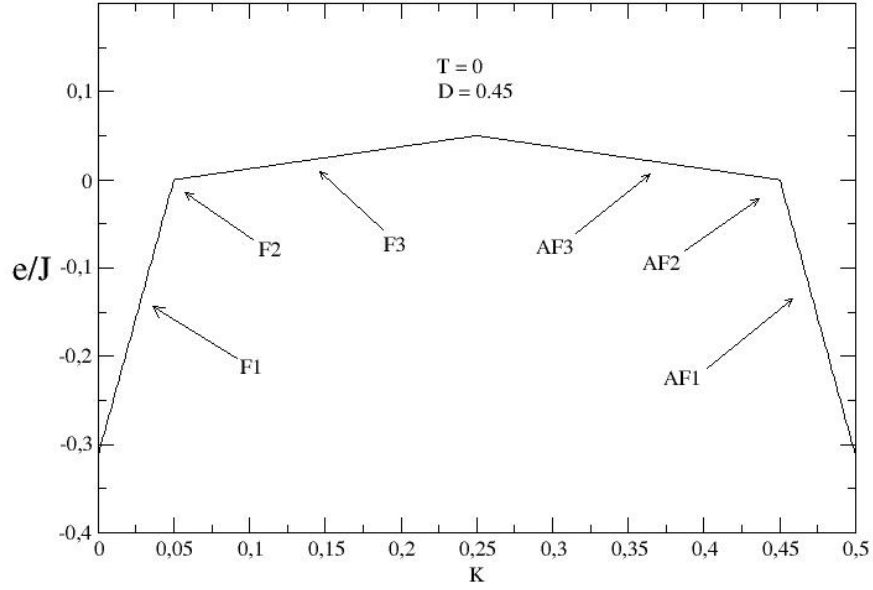


Figura 3.6: Gráfica densidad de energía(e) versus K para $D = 0.45$ y $T = 0$ donde se observa transiciones de fase de primer orden. Para este valor particular de D no existen otras fases mas que las presentadas

En la figura 3.6 se observa las transiciones de fase para $T = 0$ y un valor particular $D = 0.45$. Es importante destacar que las transiciones para el sistema a $T = 0$ deben ser de primer orden y ello es debido a la discontinuidad que se observa en la curva de energía en el punto de cambio de las fases. Aquí se observa que los cambios de fase ocurren a medida que el valor de K aumenta para un $D = 0.45$. Se observa además la existencia de dos puntos multicríticos donde existen hasta tres fases, en el primero las fases son F_1 , F_2 y F_3 y el segundo son AF_1 , AF_2 y AF_3 .

3.1. Temperatura crítica para $K = 0$

Para este caso tendremos la versión pura del modelo Blume-Capel[10, 11] pero para espín 5/2.

Conociendo la forma de la función de partición

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-\frac{1}{2}\beta N J y^2} \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\frac{1}{2} J y (S_i + S_{i+1}) - K \beta S_i S_{i+1} - \frac{\beta D}{2} (S_i^2 + S_{i+1}^2)} \right] dy \quad (3.13)$$

hacemos $K = 0$ y obtenemos:

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-\frac{1}{2}\beta N J y^2} \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\frac{1}{2} J y (S_i + S_{i+1}) - \frac{\beta D}{2} (S_i^2 + S_{i+1}^2)} \right] dy \quad (3.14)$$

cuya solución no requiere de la matriz de transferencia.

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-\frac{1}{2}N\beta J y^2} \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N e^{J\beta y S_i - \beta D S_i^2} \right] dy \quad (3.15)$$

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{-\frac{1}{2}N\beta J y^2} \prod_{i=1}^N \sum_{S_i=-5/2}^{5/2} e^{J\beta y S_i - \beta D S_i^2} \right] dy \quad (3.16)$$

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}N\beta J y^2} \prod_{i=1}^N (e^{-\frac{5}{2}\beta J y - \frac{25}{4}\beta D} + e^{\frac{5}{2}\beta J y - \frac{25}{4}\beta D} + e^{-\frac{3}{2}\beta J y - \frac{9}{4}\beta D} + e^{\frac{3}{2}\beta J y - \frac{9}{4}\beta D} + e^{-\frac{1}{2}\beta J y - \frac{1}{4}\beta D} + e^{\frac{1}{2}\beta J y - \frac{1}{4}\beta D}) dy \quad (3.17)$$

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}N\beta J y^2} \prod_{i=1}^N (2e^{-\frac{25}{4}\beta D} \cosh \frac{5\beta J y}{2} + 2e^{-\frac{9}{4}\beta D} \cosh \frac{3\beta J y}{2} + 2e^{-\frac{1}{4}\beta D} \cosh \frac{\beta J y}{2}) dy \quad (3.18)$$

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}N\beta J y^2} \prod_{i=1}^N e^M dy \quad (3.19)$$

donde: $M = e^{\ln(2e^{-\frac{25}{4}\beta D} \cosh \frac{5\beta J y}{2} + 2e^{-\frac{9}{4}\beta D} \cosh \frac{3\beta J y}{2} + 2e^{-\frac{1}{4}\beta D} \cosh \frac{\beta J y}{2})}$

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}N\beta J y^2} e^{MN} dy \quad (3.20)$$

Usando la aproximación de Hubbard Stratonovich y punto silla(explicados en los apéndices y en las secciones anteriores) obtenemos la función energía libre por unidad de espín de la siguiente forma:

$$f(y_o) = \frac{1}{2} J y_o^2 - \frac{1}{\beta} \ln (2e^{-\frac{25}{4}\beta D} \cosh \frac{5\beta J y_o}{2} + 2e^{-\frac{9}{4}\beta D} \cosh \frac{3\beta J y_o}{2} + 2e^{-\frac{1}{4}\beta D} \cosh \frac{\beta J y_o}{2}) \quad (3.21)$$

Donde el valor de y_o es la magnetización m teniendo así:

$$f(m) = \frac{1}{2} J m^2 - \frac{1}{\beta} \ln (2e^{-\frac{25}{4}\beta D} \cosh \frac{5\beta J m}{2} + 2e^{-\frac{9}{4}\beta D} \cosh \frac{3\beta J m}{2} + 2e^{-\frac{1}{4}\beta D} \cosh \frac{\beta J m}{2}) \quad (3.22)$$

Realizamos la expansión de Landau para la energía libre en potencias pares como vimos anteriormente[34].

$$f(m) \approx f(0) + A_2 m^2 + A_4 m^4 + \dots \quad (3.23)$$

Obtendremos el valor de la temperatura crítica haciendo el coeficiente $A_2 = 0$.

$$A_2 = f''(0) = 0 \quad (3.24)$$

$$A_2 = J - \frac{1}{2} \frac{\left(\frac{25\beta J^2}{2} e^{-\frac{25\beta D}{4}} + \frac{9\beta J^2}{2} e^{-\frac{9\beta D}{4}} + \frac{\beta J^2}{2} e^{-\frac{\beta D}{4}} \right)}{\left(e^{-\frac{25\beta D}{4}} + e^{-\frac{9\beta D}{4}} + e^{-\frac{\beta D}{4}} \right)} = 0 \quad (3.25)$$

Para $D = 0$ tendremos:

$$1 - \frac{J}{2} \frac{\frac{25}{2} + \frac{9}{2} + \frac{1}{2}}{3} = 0 \quad (3.26)$$

$$1 = J \frac{35\beta}{12} \quad (3.27)$$

con $\beta = \frac{1}{K_B T}$ tendremos: $T_C = \frac{35}{12}$ haciendo $\frac{J}{K_B} = 1$. Mediante cálculos numéricos de minimización de la energía libre se pudo obtener el valor de la temperatura crítica en unidades reducidas de $T_C = 2.916380$ para $D = 0$ y $K = 0$ con un error de ± 0.006 mientras que con el método de expansión de Landau se obtuvo el valor de 2.91666.

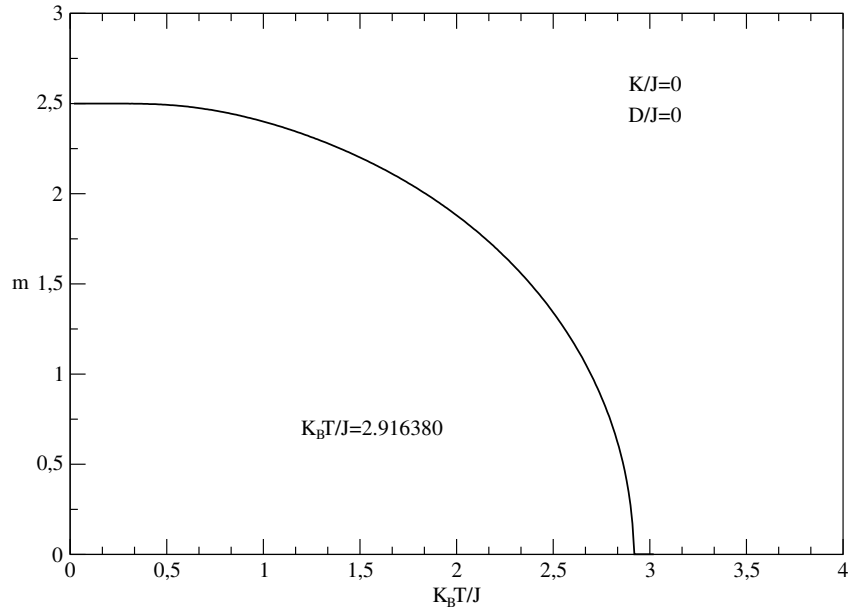


Figura 3.7: Gráfica de la magnetización versus temperatura para valores de $K/J = 0$ y $D/J = 0$.

Esta gráfica(figura 3.7) y las demas que representan la magnetización versus la temperatura fueron obtenidas minimizando la función densidad de energía libre para un juego determinado de valores de K/J y D/J fijos. Como se explico antes, se busca aquellos valores de $K_B T/J$ y m que minimizan la función densidad de energía libre con $K_B/J = 1$ y $J = 1$.

$$f(m) = \frac{1}{2} J m^2 - \frac{1}{\beta} \ln(\lambda_{max}) \quad (3.28)$$

3.2. Diagrama de fases para el sistema

A continuación se analizará la topología de los diagramas de fase encontrados para ciertos valores de K/J . El método a realizar es computacional y consiste en buscar los valores de las temperaturas críticas para diferentes valores del parámetro D/J y K/J , con estos valores es posible crear el diagrama de fases para un valor particular de K/J además de identificar que tipo de transición (de primer o segundo orden) se ha dado, es importante hacer notar que se han encontrado hasta cinco transiciones de fase para algunos valores particulares de los parámetros D/J y K/J , esto es hasta cinco valores de temperatura crítica, también se ha encontrado la existencia de puntos multicríticos en este sistema.

Se procederá como en trabajos similares (ver figuras 1,2,3 de Ref.[51]) a analizar el diagrama de fase resultante para el valor particular de $K/J = 0$.

Primero veamos como es la evolución de las fronteras paramagnéticas a medida que aumenta el valor de K/J .

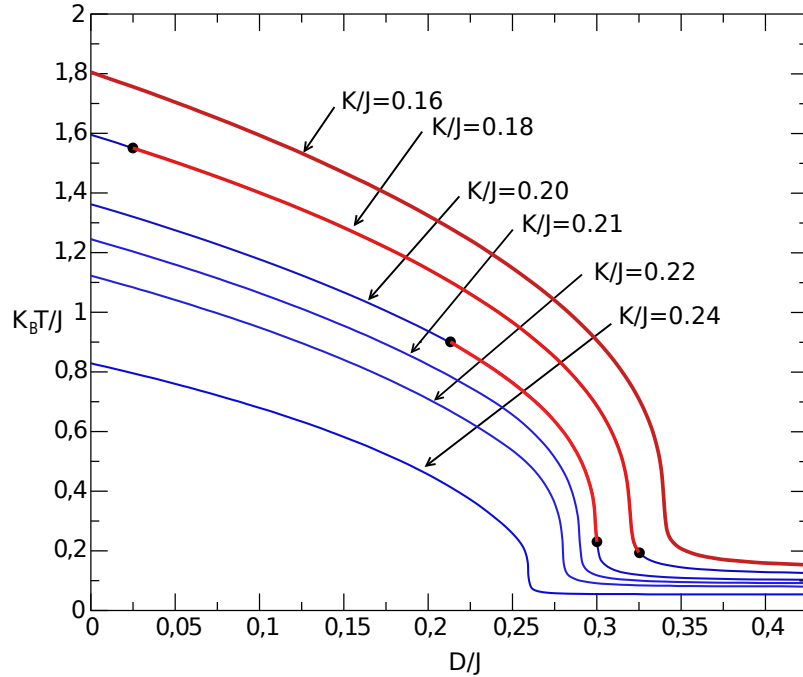


Figura 3.8: Gráfica del diagrama de fase para K/J que varía. Las líneas de color rojo representan transiciones de segundo orden y las de color azul representan transiciones de primer orden. Los puntos negros en las curvas representan puntos tricríticos que marcan el cambio de una frontera de segundo orden a una de primer orden.

En la figura 3.8 se observa que las fronteras de segundo orden se van cerrando cada vez mas hasta convertirse todas en fronteras de primer orden.

3.2.1. Diagrama de Fase para $K/J = 0$

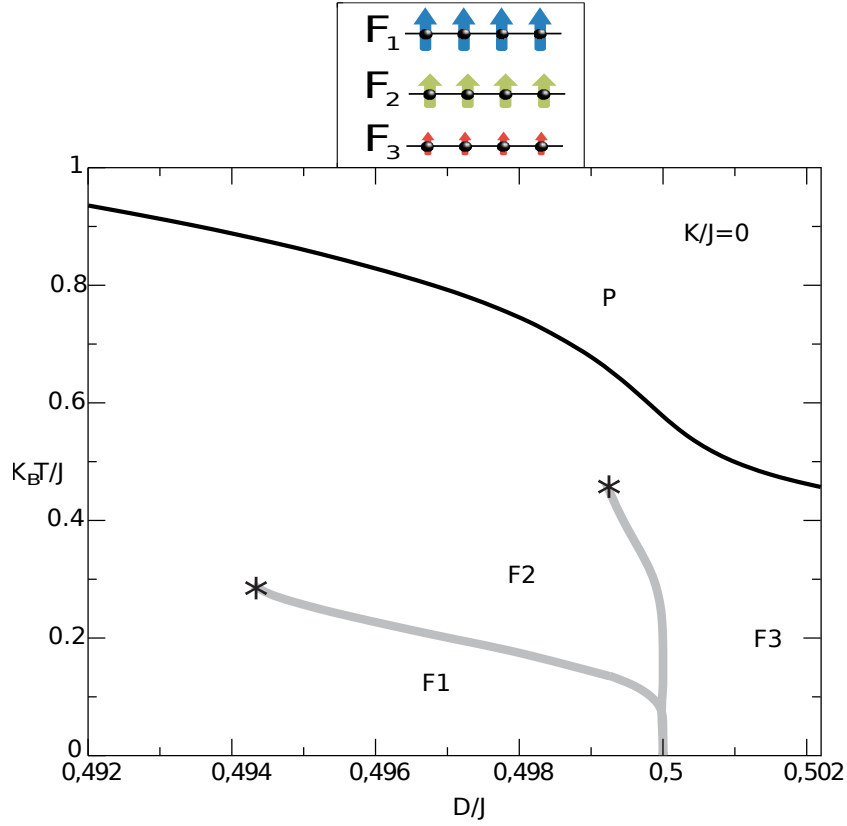


Figura 3.9: Gráfica del diagrama de fase para $K/J = 0$. La curva de color negro representa fronteras de segundo orden y las líneas de color gris representan fronteras de primer orden. Aquí se observa que para $K/J = 0$ solo existen las fases $F1$, $F2$, $F3$ y la fase paramagnética P . Los asteriscos muestran el fin de las fronteras. En la parte superior de la gráfica se observa el ordenamiento respectivo para cada fase.

En la figura 3.9 se observa que para $K/J = 0$ existe una frontera de segundo orden que divide las fases ferromagnéticas $F1$, $F2$ y $F3$ de la fase paramagnética (P). Además se observa que las transiciones entre las fases $F1$, $F2$ y $F3$ son de primer orden.

Aquí surge una pregunta, ¿cómo sabemos que para $K/J = 0$ existe la fase $F2$ o la fase $F3$? Pues como estas fases muestran la misma magnetización promedio, con el método desarrollado en este trabajo, es decir, el de la minimización de la energía libre es imposible responder esa pregunta, pero, realizando una simulación Monte-Carlo sí se puede dar respuesta pues así se puede saber cual es la distribución final del sistema y así encontrar la configuración final de equilibrio y su respectiva magnetización; ese trabajo de simulación no es parte de esta tesis, pero, en una publicación de la cual el autor de esta tesis fue parte se realizó y publicó esa simulación como parte de un trabajo[29] mas grande y ahí se encontró que de las dos configuraciones solo perdura la configuración que corresponde a la fase $F2$.

En las gráficas que siguen se mostrara el comportamiento de la magnetización para ciertos valores particulares de D/J , $K_B T/J$ para $K/J = 0$.

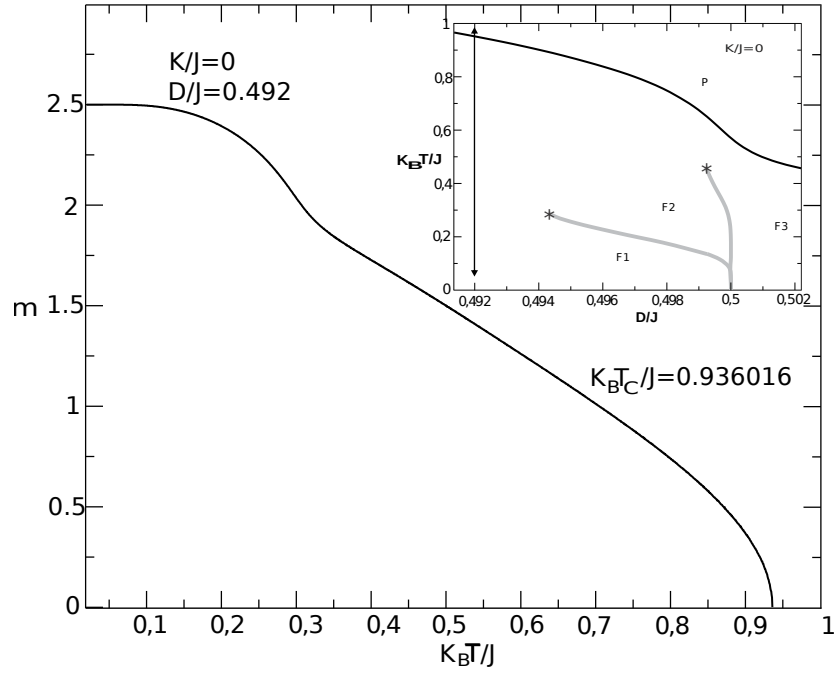


Figura 3.10: Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para los valores de $K/J = 0$ y $D/J = 0.492$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0$ donde la línea vertical muestra un punto de una frontera de segundo orden que se está observando.

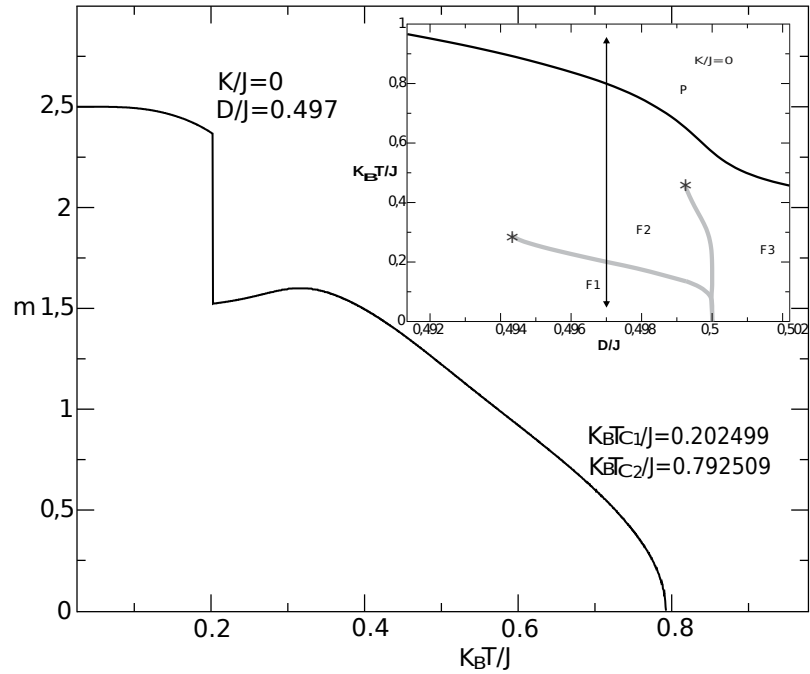


Figura 3.11: Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para los valores de $K/J = 0$ y $D/J = 0.497$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0$ donde la línea vertical muestra dos puntos de frontera, uno de primer orden y el otro de segundo orden que se están observando.

En la figura 3.10 se observa como la temperatura crítica en unidades reducidas tiene

un valor de 0.936016 siendo además una transición de segundo orden, aquí el sistema cae de una fase ferromagnética hacia una fase paramagnética pues la magnetización cae a 0.

En la figura 3.11 se observa dos transiciones de fase siendo una de primer orden y la otra de segundo orden. Además hay un comportamiento peculiar que se observa en la magnetización, si observamos con cuidado la figura anterior veremos que hay una zona en la cual a medida que la temperatura aumenta la magnetización también aumenta, este comportamiento es inusual pues la magnetización debería disminuir siempre pues como sabemos a medida que la temperatura aumenta también aumenta el desorden en un sistema, esto quiere decir que se esperaría que la magnetización disminuya en lugar de aumentar.

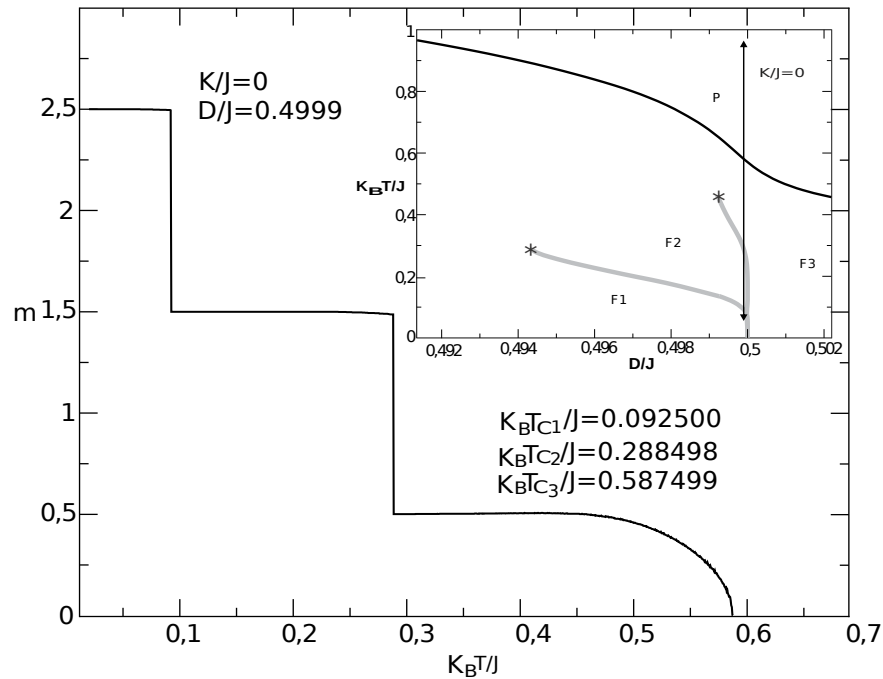


Figura 3.12: Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para los valores de $K/J = 0$ y $D/J = 0.4999$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0$ donde la línea vertical muestra tres puntos de frontera, uno de segundo orden y dos de primer orden que se están observando.

En la figura 3.12 se observa la aparición de tres fases magnéticas pues se observa tres transiciones magnéticas, dos son de primer orden y la última la que lleva al sistema a fase paramagnética es de segundo orden. Notar que siempre las transiciones entre las fases ferromagnéticas son de primer orden y las transiciones hacia la fase paramagnética son siempre de segundo orden para este valor del parámetro K .

Ahora se analizará el comportamiento de la densidad de energía libre para valores particulares de $K_B T/J$ y D/J que pertenecen a las fronteras de primer o segundo orden según sea el caso para $K/J = 0$.

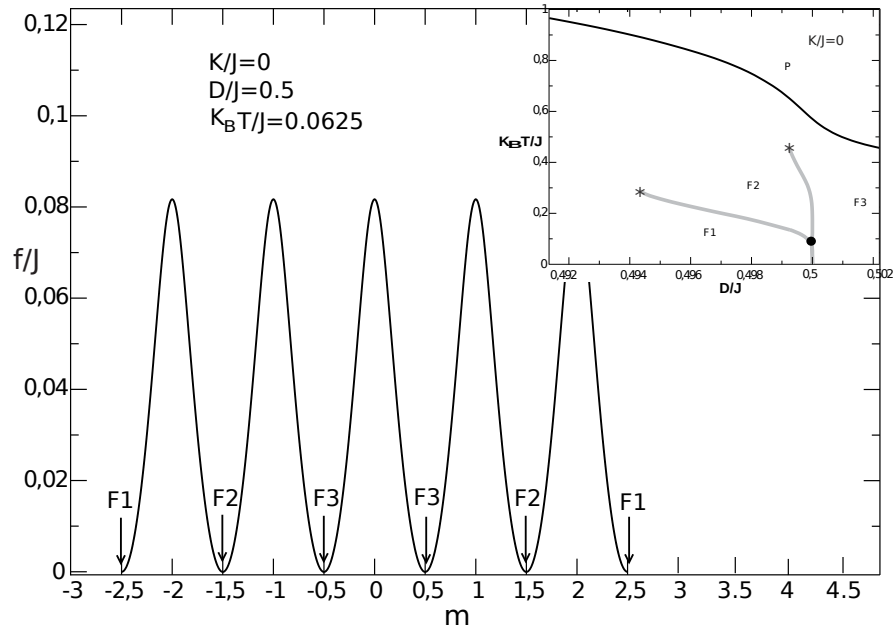


Figura 3.13: Gráfica de densidad de energía libre versus m . Vemos que para estos valores de K/J , D/J y $K_B T/J$, la energía libre es igualmente minimizada por varias fases, lo cual muestra una coexistencia de las mismas. El punto negro en la gráfica superior derecha localiza el punto multicrítico donde coexisten estas fases (en el diagrama de fases respectivo).

En la figura 3.13 se observa la existencia de tres mínimos globales en la densidad de energía libre lo cual nos muestra que estamos en un punto multicrítico donde conviven las fases $F1$, $F2$ y $F3$.

3.2.2. Diagramas de Fase para $K/J > 0$

A continuación se mostrarán los diagramas de fase, curvas de magnetización y gráficas de energía libre obtenido para algunos valores de $K/J > 0$. Se escogieron los valores de $K/J = 0.24$, $K/J = 0.249$ y $K/J = 0.2499$ por tener curvas y comportamientos interesantes pues están muy cerca del valor límite de $K/J = 0.25$.

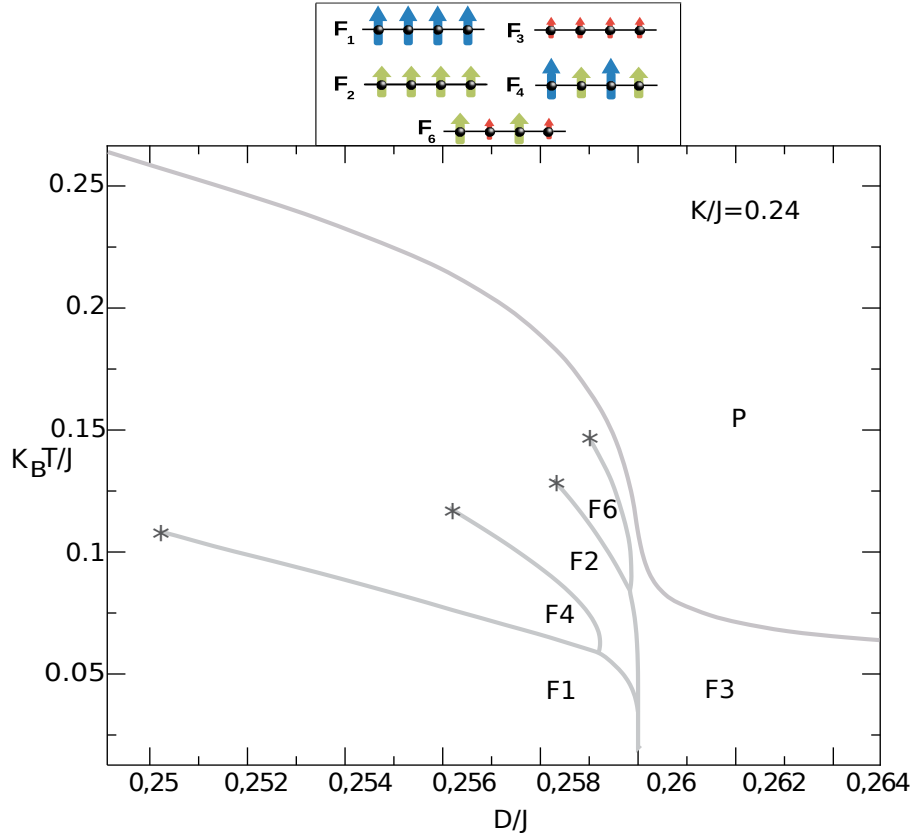


Figura 3.14: Gráfica del diagrama de fase para $K/J = 0.24$. Todas las fronteras son de primer orden. En la parte superior de la gráfica se observa el ordenamiento respectivo de cada fase.

Aquí en la figura 3.14 se observa que todas las transiciones de segundo orden han desaparecido y ahora todas las transiciones son de primer orden, además se observa la aparición de hasta tres puntos multicríticos donde confluyen tres fases. Se observa que ahora existen las $F1$, $F2$, $F3$, $F4$ y $F6$.

A continuación se analizará el comportamiento de la magnetización para este valor de K .

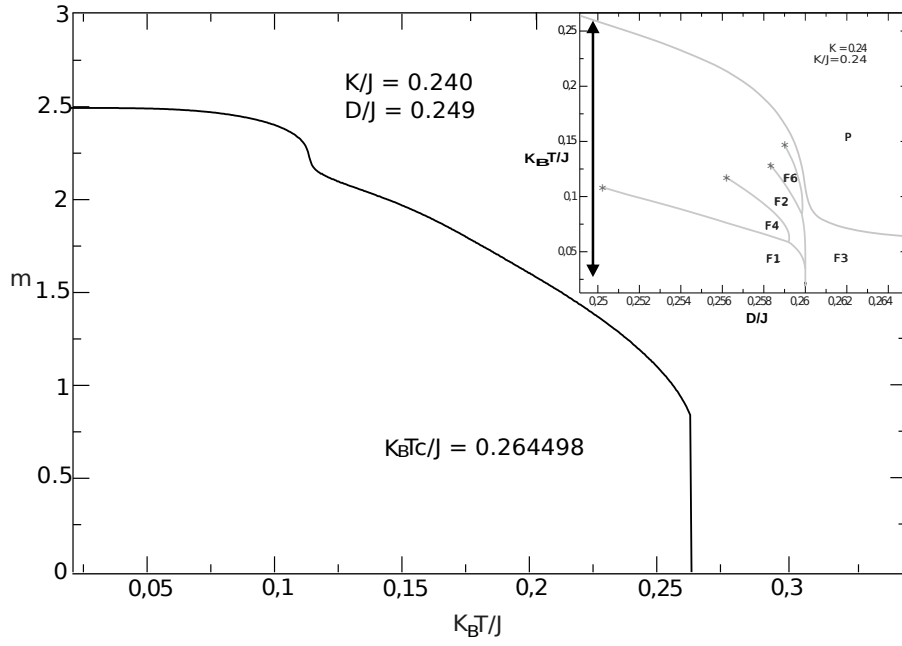


Figura 3.15: Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para $D/J = 0.249$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.24$ donde la línea vertical muestra un punto de una frontera de primer orden que se está observando.

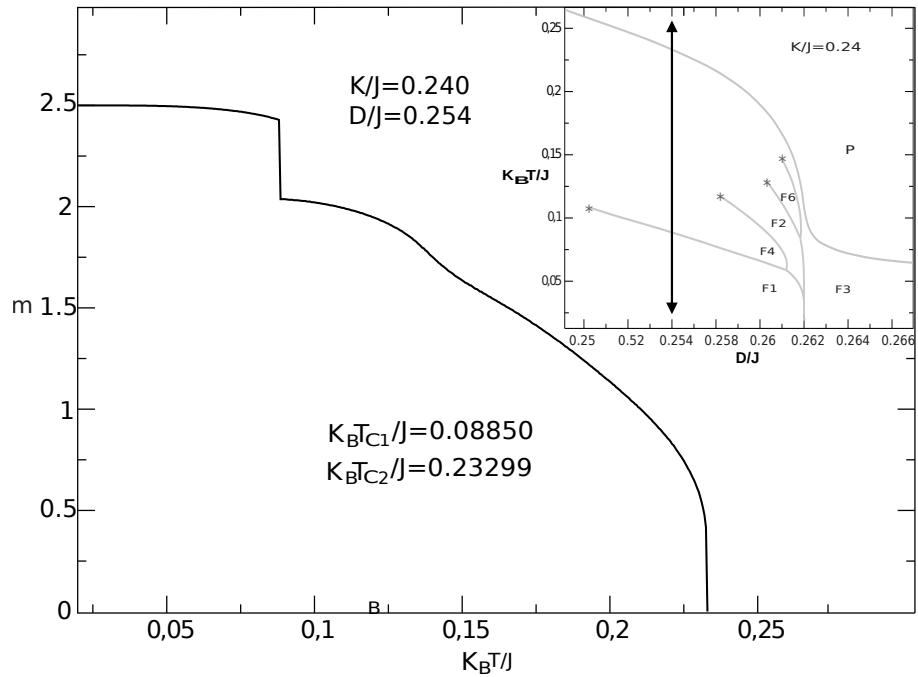


Figura 3.16: Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para $D/J = 0.254$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.24$ donde la línea vertical muestra dos puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

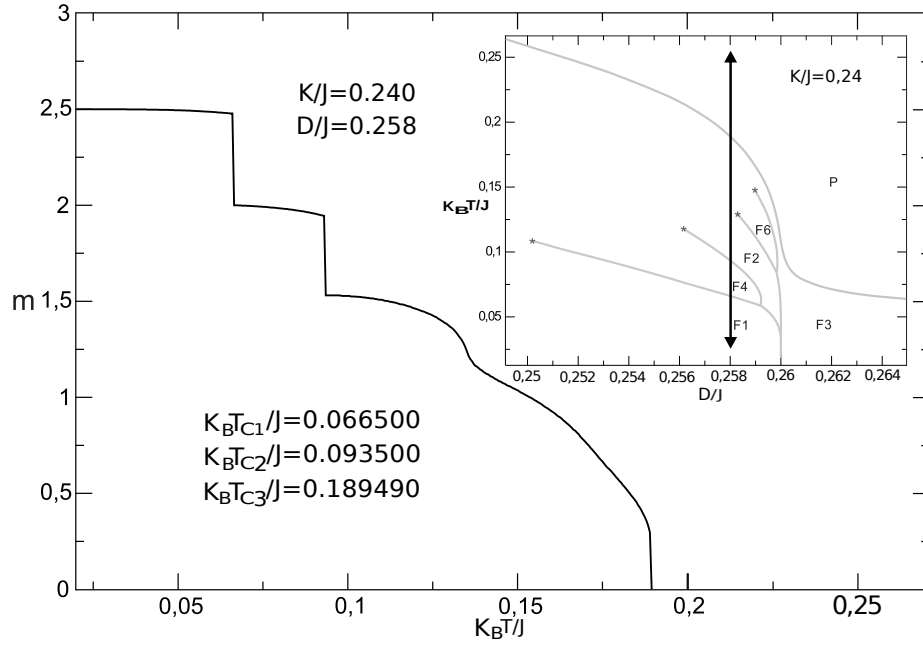


Figura 3.17: Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para $D/J = 0.258$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.24$ donde la línea vertical muestra tres puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

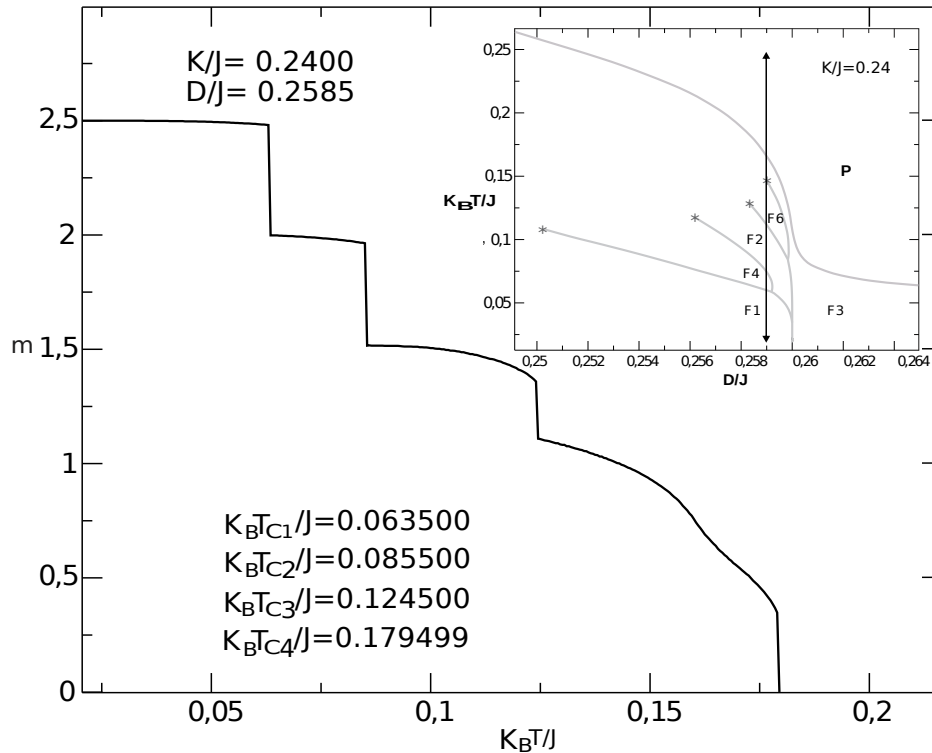


Figura 3.18: Gráfica de magnetización versus $K_B T/J$ para $D/J = 0.2585$, en la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.24$ donde la línea vertical muestra cuatro puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

En las figuras desde 3.15 a 3.18 se observa las temperaturas críticas que el sistema

muestra. A continuación se mostrara el comportamiento de la energía libre para ciertos valores particulares de D/J y $K_B T/J$ donde se observará los mínimos globales de la energía libre lo cual nos dira la fase o fases que existen.

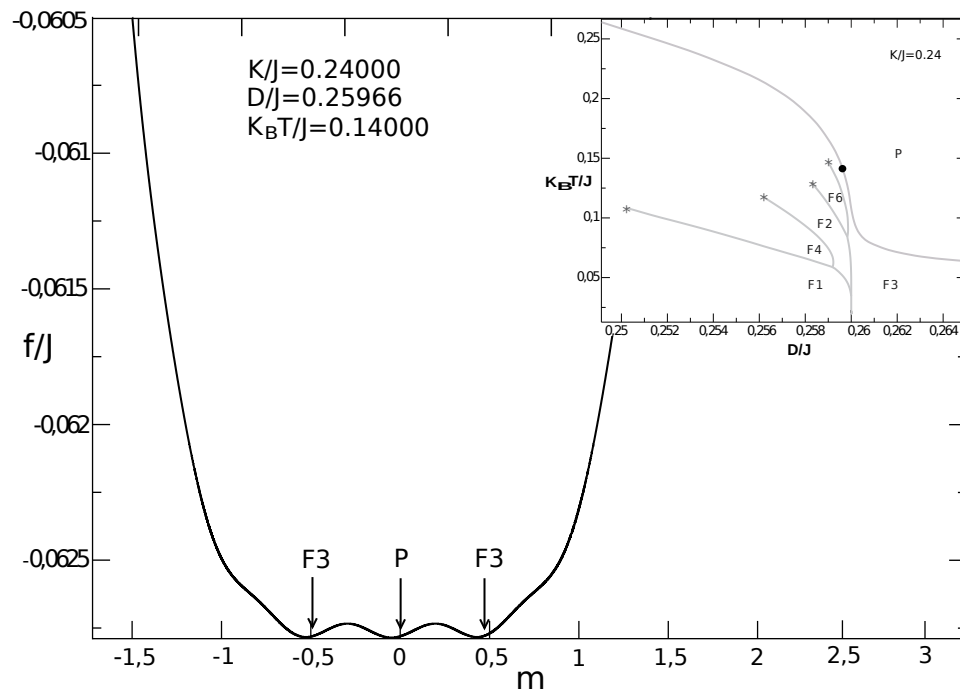


Figura 3.19: Gráfica de energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_3 y la fase paramagnética P para el valor de $K/J = 0.24$. En la parte superior derecha se muestra la parte del diagrama de fases que se está observando indicandose este con un punto negro.

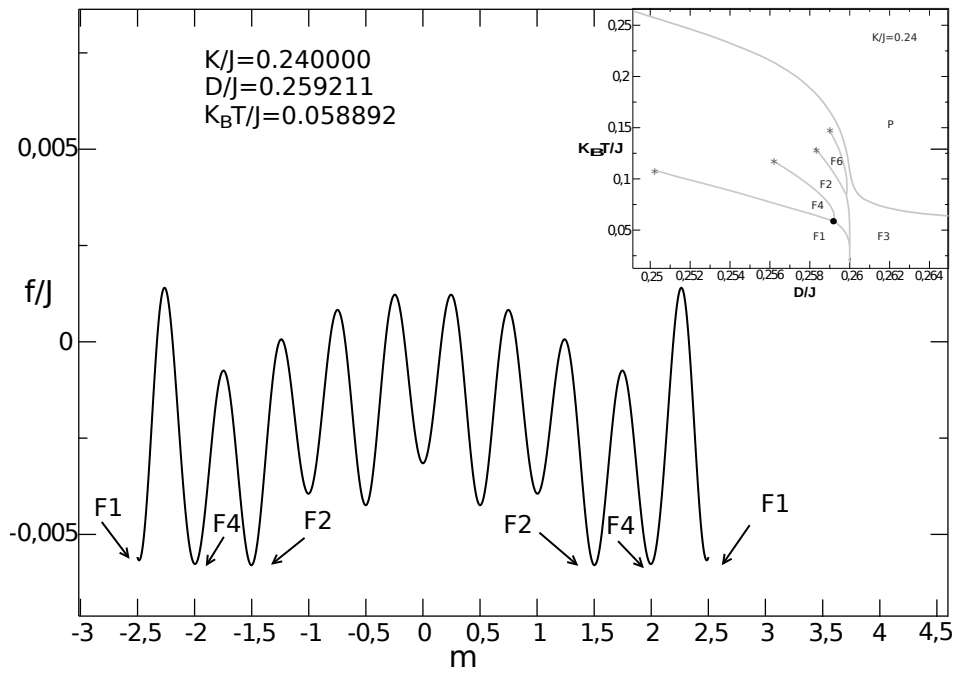


Figura 3.20: Gráfica de energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_1 , F_2 y F_4 para el valor de $K/J = 0.24$. Aquí está representado un punto multicrítico. En la parte superior derecha se muestra la parte del diagrama de fases que se está observando indicándose este con un punto negro.

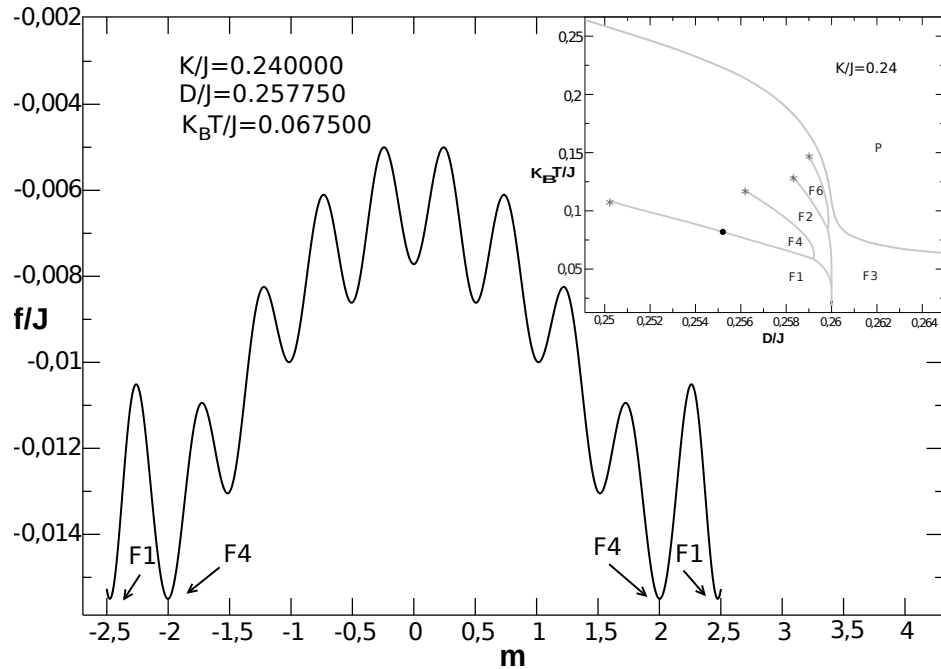


Figura 3.21: Gráfica energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_1 y F_4 para el valor de $K/J = 0.24$. En la parte superior derecha se muestra la parte del diagrama de fases que se está observando indicándose este con un punto negro.

En las figuras desde 3.19 a 3.21 se muestra el comportamiento de la energía libre,

se muestra los mínimos globales que nos indican en que fase o fases se encuentra el sistema.

A continuación se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$.

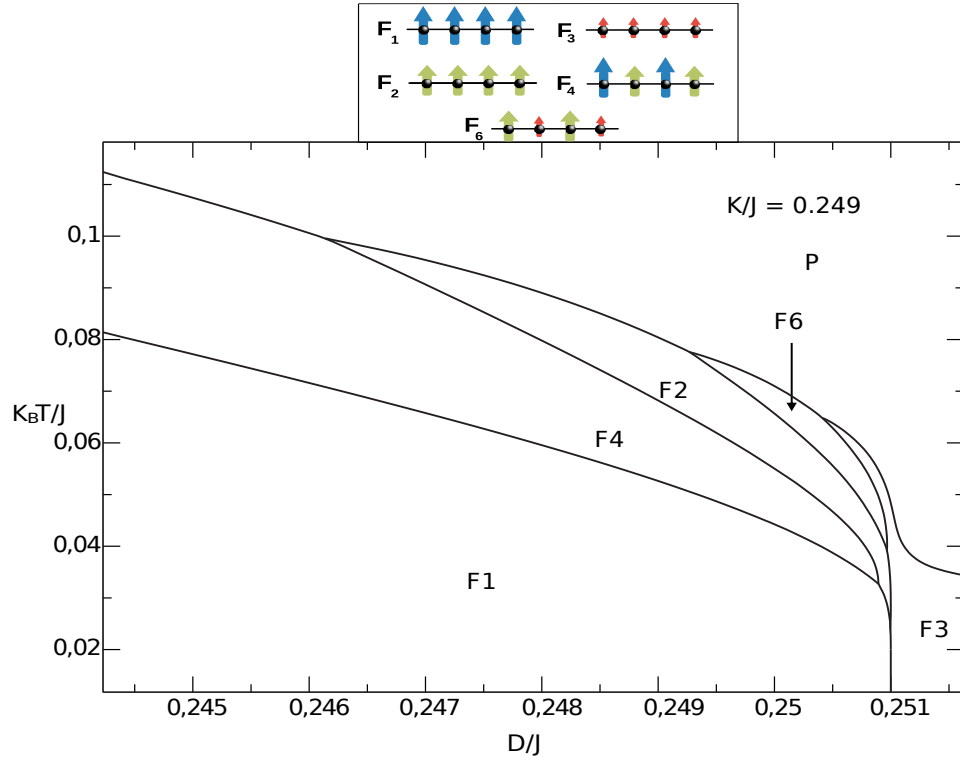


Figura 3.22: Gráfica del diagrama de fases para $K/J = 0.249$. Todas las fronteras son de primer orden. En la parte superior de la gráfica se observa el ordenamiento respectivo para cada fase.

A continuación se observará el comportamiento de la magnetización vs $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y en cada gráfica se mostrará que zona del diagrama de fases que se está observando.

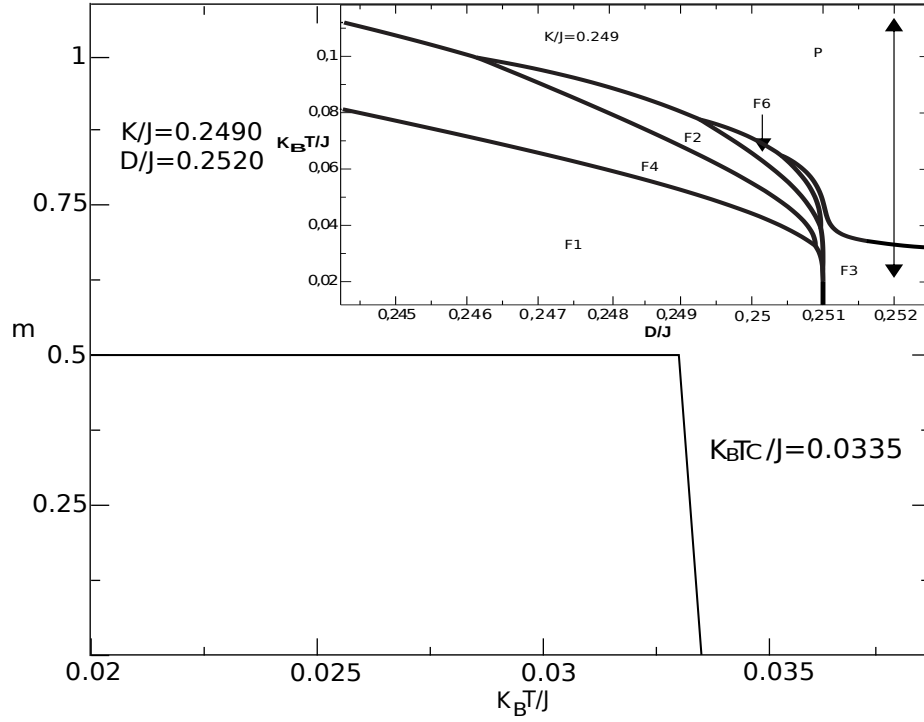


Figura 3.23: Gráfica magnetización versus $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y $D/J = 0.252$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ donde la línea vertical muestra un punto de una frontera de primer orden que se está observando.

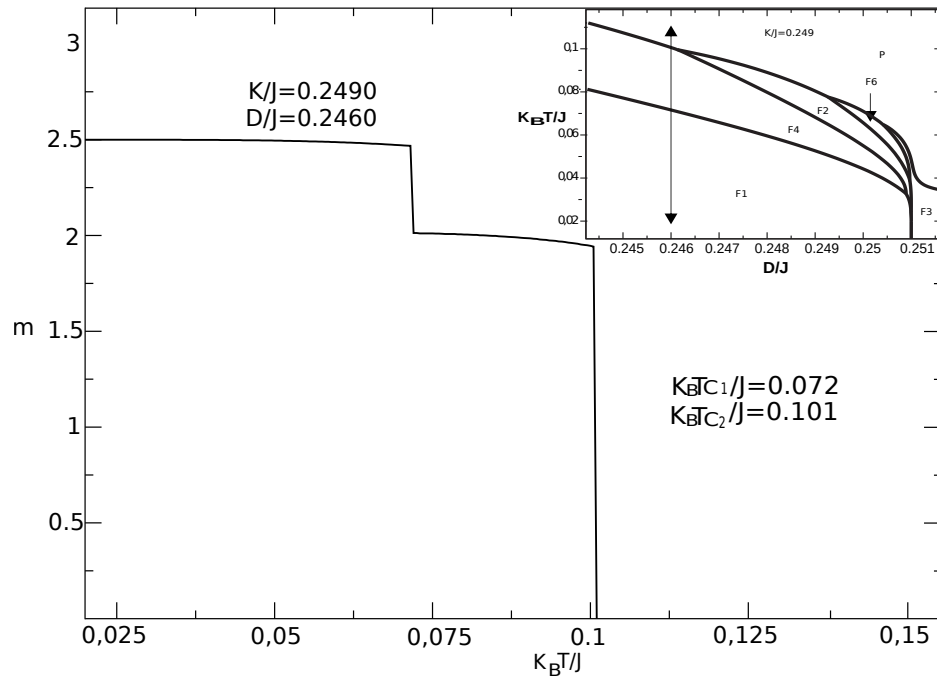


Figura 3.24: Gráfica magnetización versus $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y $D/J = 0.246$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ donde la línea vertical muestra dos puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

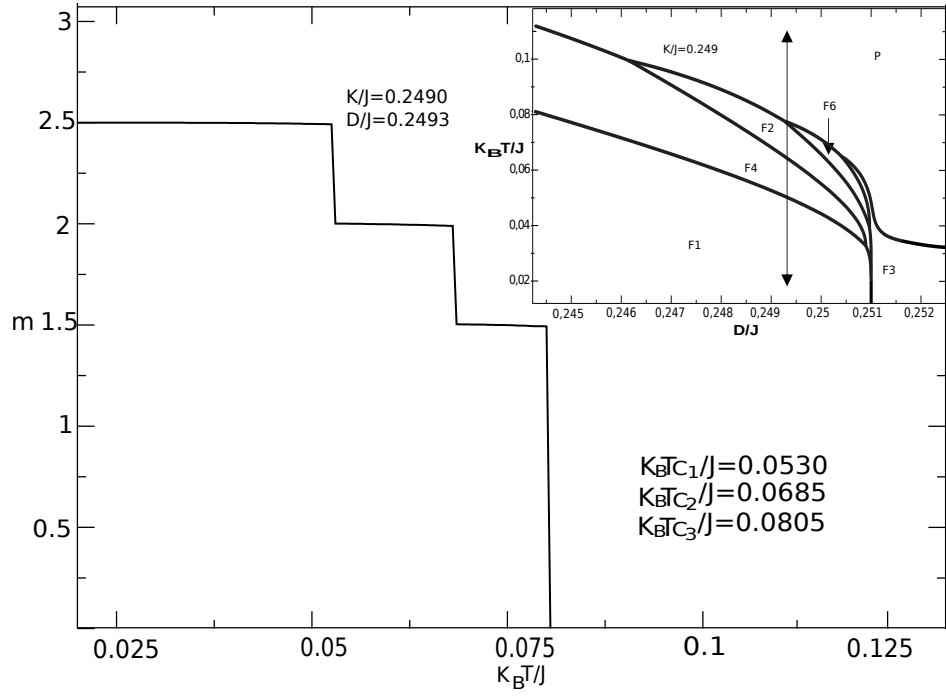


Figura 3.25: Gráfica magnetización versus $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y $D/J = 0.2493$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ donde la línea vertical muestra tres puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

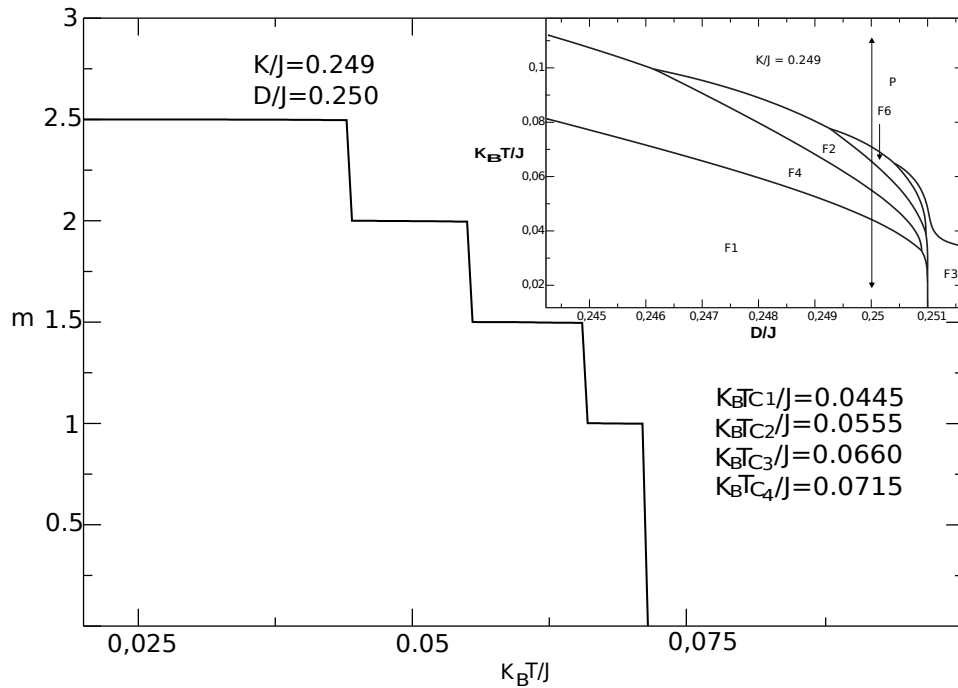


Figura 3.26: Gráfica magnetización versus $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y $D/J = 0.250$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ donde la línea vertical muestra cuatro puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

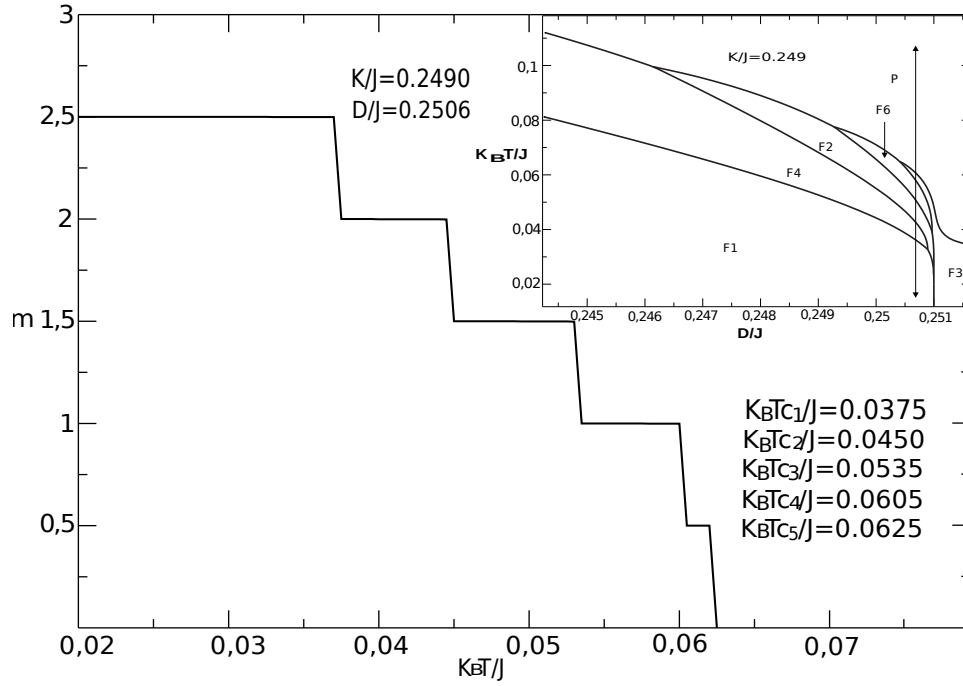


Figura 3.27: Gráfica magnetización versus $K_B T/J$ para $K/J = 0.249$ y $D/J = 0.2506$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ donde la línea vertical muestra cinco puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

En la figura 3.23 se observa una transición de fase de primer orden hacia la fase paramagnética. En la figura 3.24 se observa dos transiciones de fase de primer orden. En la figura 3.25 se observa que el sistema atraviesa tres transiciones de fase de primer orden. En la figura 3.26 se observa que el sistema atraviesa por cuatro transiciones de fase de primer orden. En la figura 3.27 se observa que el sistema atraviesa por cinco fronteras de primer orden.

A continuación se estudiara el comportamiento de la energía libre, se observará la aparición de puntos multicríticos que aparecen en el sistema para $K/J = 0.249$.

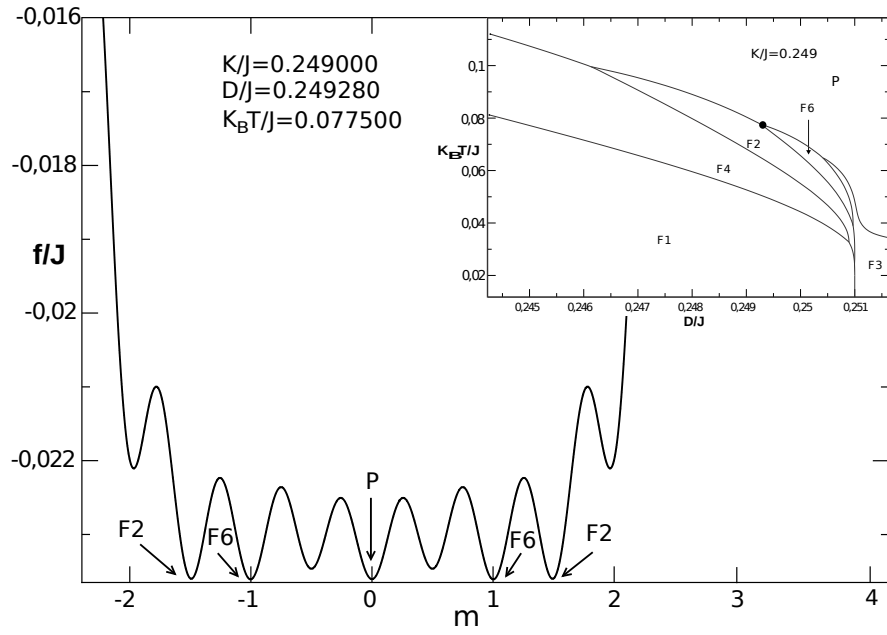


Figura 3.28: Gráfica energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_2 , F_6 y la fase paramagnética P para el valor de $K/J = 0.249$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ indicándose con un punto negro la parte del diagrama que se está observando.

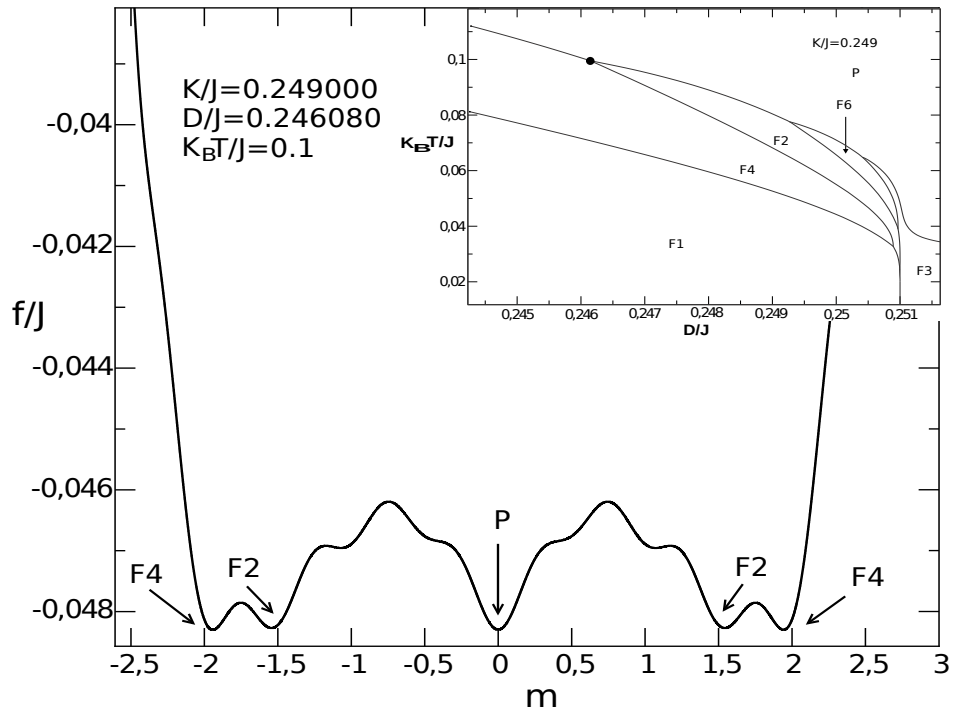


Figura 3.29: Gráfica energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_4 , F_2 y la fase paramagnética P para el valor de $K/J = 0.249$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ indicándose con un punto negro la parte del diagrama que se está observando.

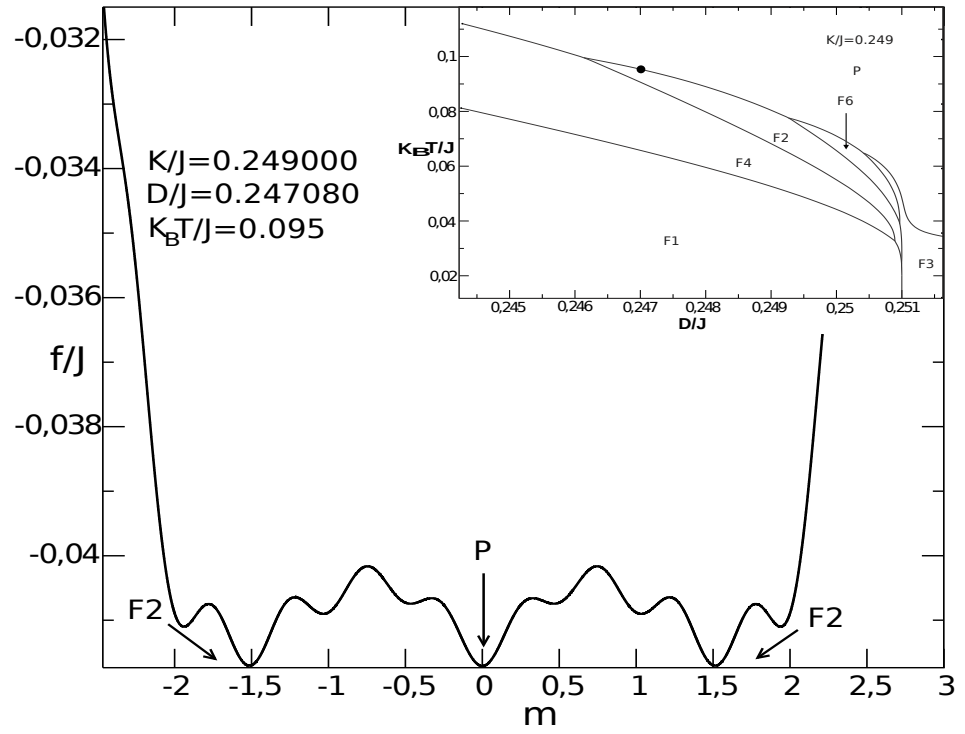


Figura 3.30: Gráfica energía libre versus magnetización. Se muestra la convivencia de las fases F_2 y la fase paramagnética P para el valor de $K/J = 0.249$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.249$ indicándose con un punto negro la parte del diagrama que se está observando.

A continuación se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$.

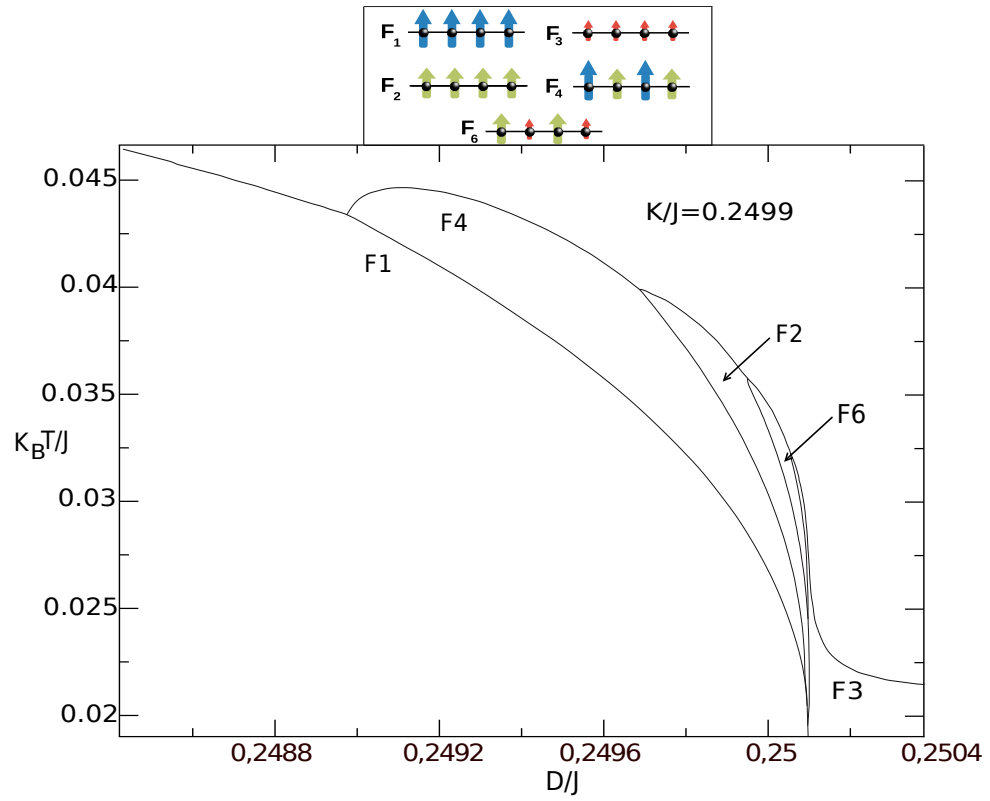


Figura 3.31: Gráfica del diagrama de fase para $K/J = 0.2499$. Todas las fronteras son de primer orden. En la parte superior de la gráfica se observa el ordenamiento respectivo para cada fase.

En las gráficas que siguen analizaremos la variación de la magnetización vs D/J para encontrar las D_c/J .

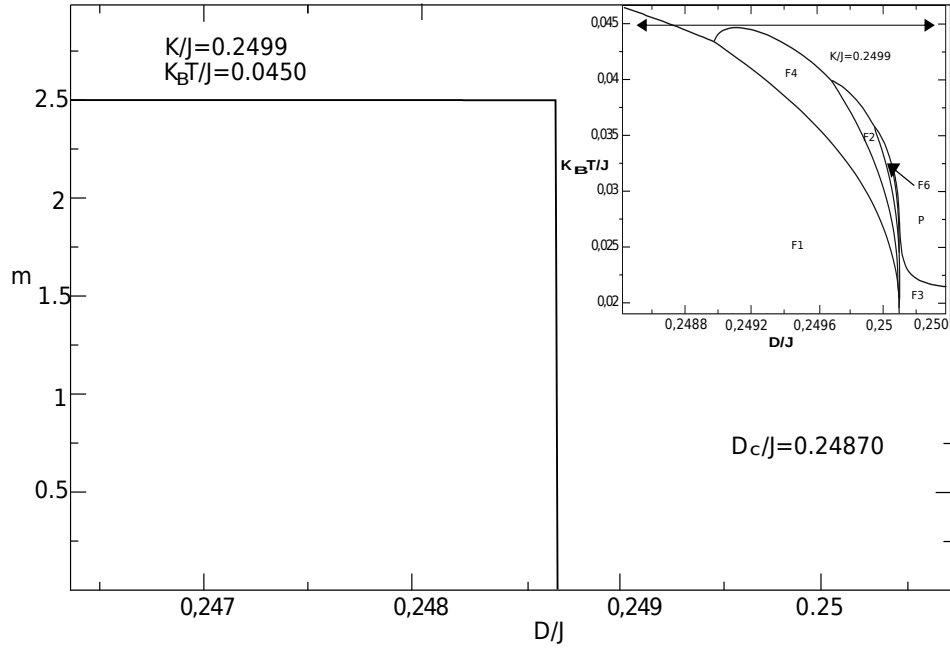


Figura 3.32: Gráfica magnetización versus D/J para $K/J = 0.2499$ y $K_B T/J = 0.045$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$ donde la línea horizontal muestra un punto de una frontera de primer orden que se está observando.

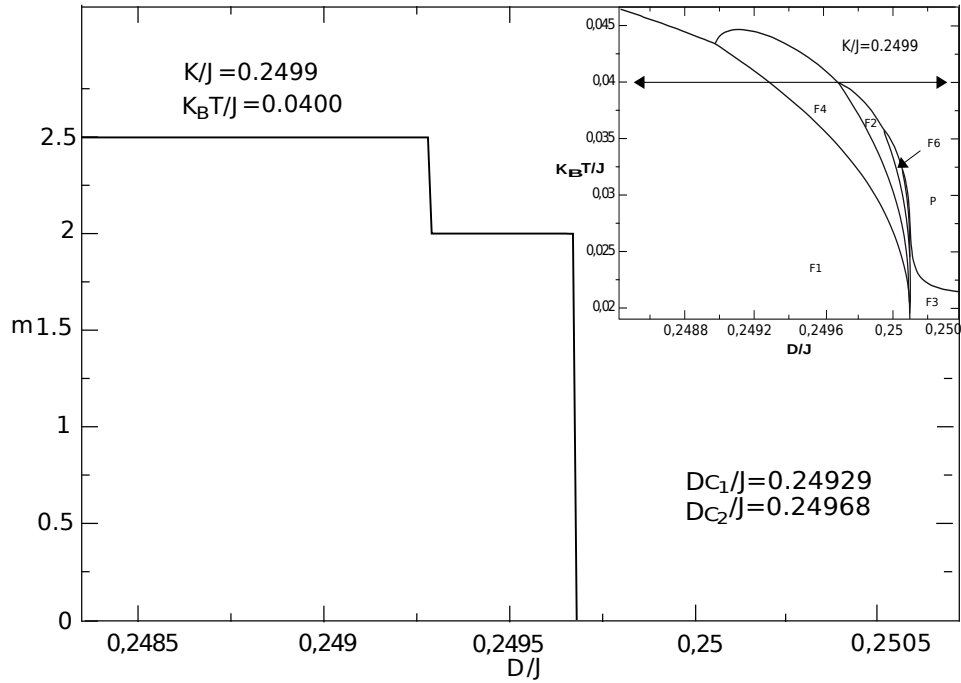


Figura 3.33: Gráfica magnetización versus D/J para $K/J = 0.2499$ y $K_B T/J = 0.04$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$ donde la línea horizontal muestra dos puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

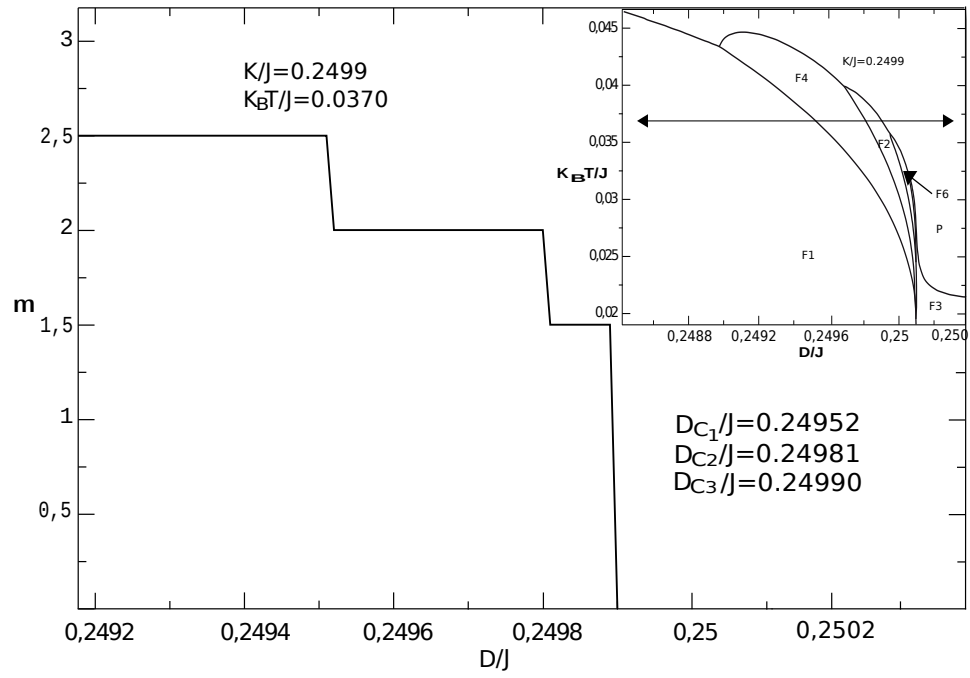


Figura 3.34: Gráfica magnetización versus D/J para $K/J = 0.2499$ y $K_B T/J = 0.037$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$ donde la línea horizontal muestra tres puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

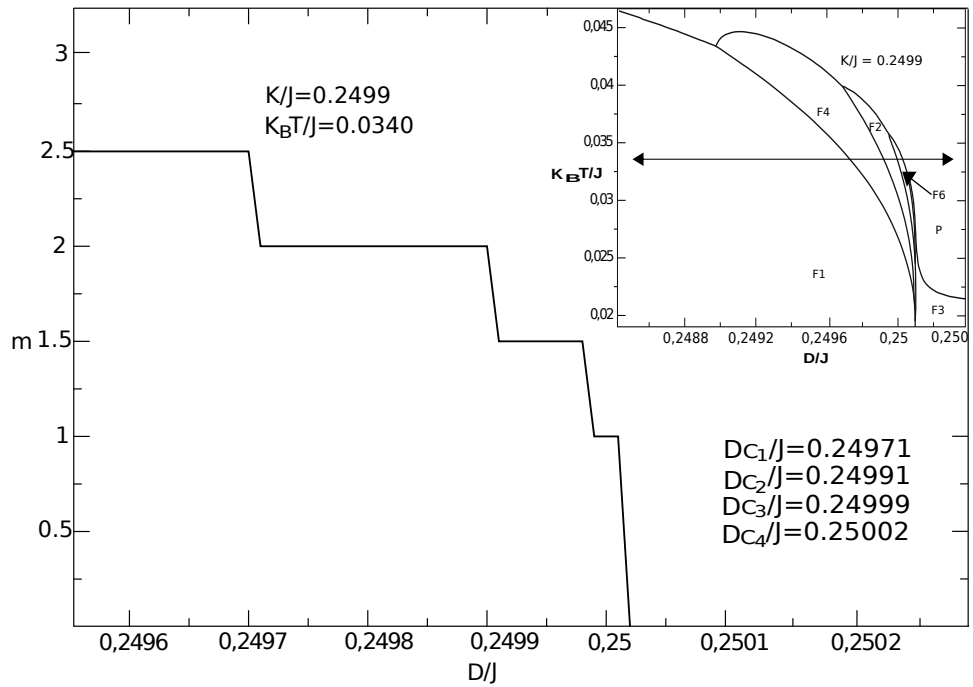


Figura 3.35: Gráfica magnetización versus D/J para $K/J = 0.2499$ y $K_B T/J = 0.034$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$ donde la línea horizontal muestra cuatro puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

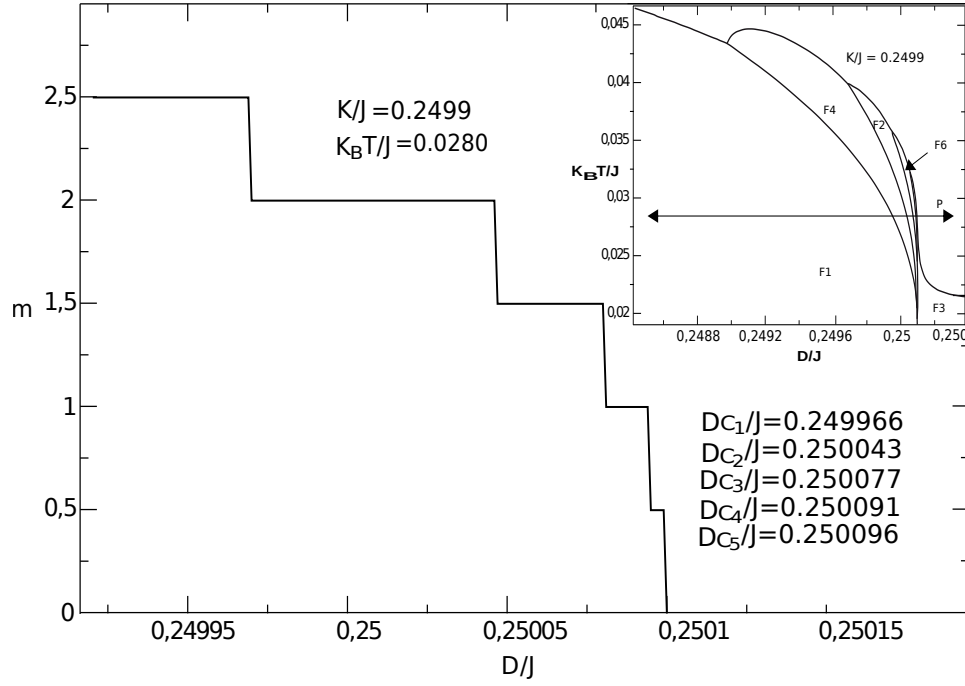


Figura 3.36: Gráfica magnetización versus D/J para $K/J = 0.2499$ y $K_B T/J = 0.028$. En la parte superior derecha se muestra el diagrama de fases para $K/J = 0.2499$ donde la línea horizontal muestra cinco puntos de fronteras de primer orden que se están observando.

En la gráfica de la figura 3.32 se observa una transición de primer orden. En la gráfica de la figura 3.33 se observa que el sistema atraviesa por dos transiciones de primer orden. En la gráfica de la figura 3.34 se observa que el sistema atraviesa por tres transiciones de fase. En la gráfica de la figura 3.35 se observa que el sistema atraviesa por cuatro transiciones de fase. En la gráfica de la figura 3.36 se observa que el sistema para $K/J = 0.2499$ atraviesa cinco transiciones de fase de primer orden.

Es importante resaltar que el procedimiento para construir las fronteras de transición requiere la búsqueda de las $K_B T_c/J$ y su respectivo D_c/J .

Con todo lo visto anteriormente se ha estudiado el comportamiento de este modelo para valores de $K/J = 0$, $K/J = 0.24$, $K/J = 0.249$, $K/J = 0.2499$ y además para $T = 0$.

3.3. Conclusiones

Este trabajo confirma las características esenciales encontrados en los diagramas de fase estudiados anteriormente en artículos que trataron el caso de espín $3/2$ [23], la topología de los diagramas de fase para espín $3/2$ y $5/2$ son similares (ver figura 1 de ref [23]). Se observó que para valores grandes de S , algunos ordenamientos de espines que no están presentes para $K = 0$ ahora aparecen en el punto $(K, D) = (0.25, 0.25)$ encontrándose además este punto como un punto multicrítico donde todos los ordenamientos tanto ferromagnéticos (F) como antiferromagnéticos (AF) existen. Estos puntos llenan algunas áreas en los diagramas de fase a medida que K se aproxima a 0.25. A partir de valores $K > 0$ para $T = 0$ se observó que existen solo fases AF y aunque ya se mencionó antes, es importante notar que para $T > 0$ las fases AF desaparecen

pues el aporte AF es el de una cadena unidimensional de Ising, es justamente la interacción a primeros vecinos y es bien conocido que para una cadena unidimensional de Ising no existe magnetización espontánea.

De la figura 3.11 se observa un comportamiento inusual en la magnetización pues como se dijo antes debería esperarse que la magnetización disminuya a medida que la temperatura aumenta pero ello no sucede, en cambio la magnetización aumenta y luego disminuye hacia la fase paramagnética, esto ha sido observado y publicado en trabajos previos(ver figura 2 de la ref[23]), este comportamiento además ha sido comprobado mediante simulaciones [29].

Se ha encontrado la existencia de puntos críticos y multicríticos en este modelo. Se ha encontrado que las fronteras de transición de segundo orden se van cerrando a medida que el valor de K aumenta hasta convertirse en fronteras de primer orden. Por último se observa en el modelo que todas las transiciones entre fases ferromagnéticas F son siempre transiciones de primer orden. De esta manera se ha podido ver cómo la constante K actúa también como un reductor del comportamiento multidimensional en este sistema.

Apéndice A

Método potencia para calcular el maximo autovalor

Sea $\vec{u} \in \mathbb{R}^n$, y sea \vec{A} una matriz de $n \times n$ componentes y diagonalizable. Se puede demostrar que la siguiente secuencia converge a un múltiplo del autovector con mayor autovalor:

$$\vec{A}\vec{u}, \vec{A}^2\vec{u}, \vec{A}^3\vec{u}, \dots, \vec{A}^m\vec{u} \quad (\text{A.1})$$

Demostración: \vec{u} puede expresarse como una combinación lineal de los autovectores de \vec{A} .

Entonces:

$$\vec{u} = c_1 \vec{x}_1 + c_2 \vec{x}_2 + \dots + c_n \vec{x}_n \quad (\text{A.2})$$

donde \vec{x}_i es el autovector i con autovalor λ_i .

Ahora sea \vec{x}_k el autovector que tiene el mayor autovalor λ_k .

$$\Rightarrow \vec{A}\vec{u} = \vec{A}\left(\sum_{i=1}^n c_i \vec{x}_i\right) = \sum_{i=1}^n c_i \vec{A}\vec{x}_i = \sum_{i=1}^n c_i \lambda_i \vec{x}_i$$

$$\Rightarrow \vec{A}^m\vec{u} = \sum_{i=1}^n c_i \lambda_i^m \vec{x}_i$$

$$\Rightarrow \vec{A}^m\vec{u} = \sum_{i=1}^n \lambda_i^m \vec{x}_i$$

$$\Rightarrow \vec{A}^m\vec{u} = \lambda_k^m \sum_{i=1}^n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_k}\right)^m c_i \vec{x}_i$$

$$\Rightarrow \vec{A}^m\vec{u} \rightarrow \lambda_k^m c^k \vec{x}_i$$

pero $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_k}\right)^m$ tiende a cero para m suficientemente grande

$$= \lambda_k^m \left[c_k \vec{x}_k + \sum_{i \neq k}^n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_k}\right)^m c_i \vec{x}_i \right]$$

Entonces $\vec{A}^m\vec{u}$ converge a un múltiplo del autovector \vec{x}_k que es el que produce el mayor autovalor.

Sea \vec{u} ese tal múltiplo \vec{x}_k . Entonces

$$\lambda_k \approx \frac{\vec{v} \cdot \vec{A} \cdot \vec{v}}{\vec{v} \cdot \vec{v}} \quad (\text{A.3})$$

Apéndice B

Aproximación Hubbard Stratonovich para el modelo de Ising

La aproximación de Hubbard Stratonovich es muy usada en la física estadística usualmente para el cálculo de funciones de partición para linealizar un parámetro que es argumento de una función y que matemáticamente se basa en una integral gaussiana. Se expresa de la siguiente manera:

$$e^{\frac{ax^2}{2N}} = \sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Nay^2}{2} + axy} dy \quad (\text{B.1})$$

A continuación se realizara la demostración respectiva.

$$\sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Nay^2}{2} + axy} dy = \sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Na}{2}(y^2 - 2\frac{xy}{N})} dy \quad (\text{B.2})$$

$$\sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Nay^2}{2} + axy} dy = \sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Na}{2}(y^2 - 2\frac{xy}{N} + \frac{x^2}{N^2}) + \frac{ax^2}{2N}} dy \quad (\text{B.3})$$

$$\sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Nay^2}{2} + axy} dy = \sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Na}{2}(y - \frac{x}{N})^2 + \frac{ax^2}{2N}} dy \quad (\text{B.4})$$

$$\sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Nay^2}{2} + axy} dy = \sqrt{\frac{Na}{2\pi}} e^{\frac{ax^2}{2N}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Na}{2}(y - \frac{x}{N})^2} dy \quad (\text{B.5})$$

Usando la integral gaussiana $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{y^2}{2}} dy = \sqrt{2\pi}$.

$$\sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Nay^2}{2} + axy} dy = \sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \sqrt{\frac{2\pi}{Na}} e^{\frac{ax^2}{2N}} \quad (\text{B.6})$$

$$\sqrt{\frac{Na}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{Nay^2}{2} + axy} dy = e^{\frac{ax^2}{2N}} \quad (\text{B.7})$$

Lo que queriamos demostrar.

Apéndice C

Aproximación punto de silla

Luego de aplicar la eproximación de Hubbard Stratonovich se obtiene una expresión para función de partición de la forma:

$$\mathcal{Z} = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\beta g(y)} dy \quad (\text{C.1})$$

donde:

$$g(y) = \frac{J}{2}y^2 - \frac{1}{\beta} \ln [z(y)] \quad (\text{C.2})$$

y

$$z(y) = \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\beta(JyS_i - H_i)} \quad (\text{C.3})$$

La aproximación de punto de silla aquí consiste en expandir $g(y)$ en serie de potencias alrededor de su mínimo y_o .

$$g(y) = g(y_o) + g'(y_o) + \frac{1}{2}g''(y_o)(y - y_o)^2 + \dots \quad (\text{C.4})$$

Notamos aquí que $g'(y_o)$ es cero debido a que en y_o la función tiene un mínimo. Reemplazado obtenemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\beta g(y)} dy \simeq e^{-N\beta g(y_o)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{N\beta}{2}g''(y_o)(y-y_o)^2} dy \quad (\text{C.5})$$

Ahora como la integral de la función de partición es una integral gaussiana obtenemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\beta g(y)} dy = \sqrt{\frac{2\pi}{N\beta g''(y_o)}} e^{-N\beta g(y_o)} \quad (\text{C.6})$$

donde $g''(y_o) > 0$, ya que y_o es un punto mínimo, así la función de partición para un número finito de espines viene dado aproximadamente por:

$$\mathcal{Z} \simeq \sqrt{\frac{J}{g''(y_o)}} e^{-N\beta g(y_o)} \quad (\text{C.7})$$

Ahora obtenemos a continuación la densidad de energía libre:

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{\log \mathcal{Z}}{N\beta} \right\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ g(y_o) - \frac{1}{2\beta N} \log \frac{g''(y_o)}{J} \right\} \quad (\text{C.8})$$

$$f = g(y_o) \tag{C.9}$$

donde $g(y_o)$ corresponde a $f(y_o)$ en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$). Así obtenemos la función densidad de energía como una función de y_o .

$$f = g(y_o) = \frac{1}{2} J y_o^2 - \frac{1}{\beta} \ln [z(y_o)] \tag{C.10}$$

Apéndice D

Calculo de la magnetización para el modelo Blume-Capel con espín 5/2 con la Aproximación de Campo Medio

Tenemos el Hamiltoniano para el modelo de Blume-Capel puro usando la teoría de Campo Medio expresado de la forma siguiente:

$$\mathcal{H} = -JZ \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle S_i + D \sum_i^N S_i^2 \quad (\text{D.1})$$

Calculemos la función de partición usando este Hamiltoniano

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (\text{D.2})$$

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta JZ \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle S_i - \beta D \sum_i^N S_i^2} \quad (\text{D.3})$$

$$\mathcal{Z} = \prod_{i=1}^N \sum_{\{S_i\}} e^{\beta JZ \langle S_i \rangle S_i - \beta D S_i^2} \quad (\text{D.4})$$

$$\mathcal{Z} = \prod_{i=1}^N \sum_{-5/2}^{5/2} e^{\beta JZ \langle S_i \rangle S_i - \beta D S_i^2} \quad (\text{D.5})$$

Tenemos entonces:

$$\mathcal{Z}_i = \sum_{-5/2}^{5/2} e^{\beta JZ \langle S_i \rangle S_i - \beta D S_i^2} \quad (\text{D.6})$$

Calculemos el promedio térmico

$$\langle S_i \rangle = \frac{\sum_{-5/2}^{5/2} S_i e^{\beta JZ \langle S_i \rangle S_i - \beta D S_i^2}}{\sum_{-5/2}^{5/2} e^{\beta JZ \langle S_i \rangle S_i - \beta D S_i^2}} = \frac{M_i}{N_i} \quad (\text{D.7})$$

donde:

$$\begin{aligned}
M_i &= \frac{5}{2}e^{-\frac{25}{4}\beta D} 2 \sinh\left(\frac{5}{2}\beta JZ \langle S_i \rangle\right) \\
&+ \frac{3}{2}e^{-\frac{9}{4}\beta D} 2 \sinh\left(\frac{3}{2}\beta JZ \langle S_i \rangle\right) \\
&+ \frac{1}{2}e^{-\frac{1}{4}\beta D} 2 \sinh\left(\frac{1}{2}\beta JZ \langle S_i \rangle\right)
\end{aligned} \tag{D.8}$$

$$\begin{aligned}
N_i &= 2e^{-\frac{25}{4}\beta D} 2 \cosh\left(\frac{5}{2}\beta JZ \langle S_i \rangle\right) \\
&+ 2e^{-\frac{9}{4}\beta D} 2 \cosh\left(\frac{3}{2}\beta JZ \langle S_i \rangle\right) \\
&+ 2e^{-\frac{1}{4}\beta D} 2 \cosh\left(\frac{1}{2}\beta JZ \langle S_i \rangle\right)
\end{aligned} \tag{D.9}$$

Ahora plantearemos el Hamiltoniano para el modelo tomando en cuenta un campo magnético externo H .

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 + D \sum_{i=1}^N S_i^2 - H \sum_{i=1}^N S_i \tag{D.10}$$

Con lo visto en los capítulos desarrollados podemos expresar la densidad de energía libre por espín de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
f(y_o) &= \frac{1}{2} J y_o^2 - \frac{1}{\beta} \ln \left(2e^{-\frac{25}{4}\beta D} \cosh\left(\frac{5\beta J y_o}{2} + \frac{5}{2}\beta H\right) \right. \\
&+ 2e^{-\frac{9}{4}\beta D} \cosh\left(\frac{3\beta J y_o}{2} + \frac{3}{2}\beta H\right) + 2e^{-\frac{1}{4}\beta D} \cosh\left(\frac{\beta J y_o}{2} + \frac{1}{2}\beta H\right) \left. \right)
\end{aligned} \tag{D.11}$$

Conociendo la energía libre ahora podemos conocer la magnetización de:

$$m = \lim_{H \rightarrow 0} -\frac{df}{dH} \tag{D.12}$$

Al resolver la derivada y comparar términos se obtiene que: $\langle S_i \rangle = y_o$ con $Z = 1$.

En general el término y_o que minimiza la densidad de energía libre es la magnetización.

Bibliografía

- [1] Stefano Sanvito, Corey Oses, Junkai Xue, Anurag Tiwari, Mario Zic, Thomas Archer, Pelin Tozman, Munuswamy Venkatesan, Michael Coey and Stefano Curtarolo. (2017). Accelerated discovery of new magnets in the Heusler alloy family. *Science Advance*. 3(4),1-9.
- [2] Satoru Ueda, Satoshi Koizumi y Yasuyuki Tsutsumi. (2019). Flooding and performance of polymer electrolyte fuel cell, investigated by small-angle neutron scattering, neutron radiography and segmented electrode. *Results in Physics*, 12, 504-511.
- [3] V.D. Mello, F.A.L.Santiago, D.H.A.L. Anselmo, M.S. Vasconcelos y N.S.Almeidaa. (2018). Characterization of the magnetic phases of holmium nanofilms via magnetic neutron scattering. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 475, 643-646.
- [4] Qimiao Si and Frank Steglich. (2010). Heavy fermions and quantum phase transitions. *Science*, 329(5996),1161-1166.
- [5] Renate Landing, Lorenz Hruby, Nishant Dogra, Manuele Landini, Rafael Motti, Tobias Donner and Tilman Esslinger. (2016). Quantum phases from competing short-and long-range interactions in an optical lattice. *Nature* 532, 476-479.
- [6] Martin B. Sweatman, Rui Fartaria and Leo Lu. (2014). Cluster formation in fluids with competing short-range and long-range interactions. *The Journal of Chemical Physics*, 140(124508), 1-16.
- [7] S.M.A. Cruz, J.M.C. Marques. (2017). Low-energy structures of clusters modeled with competing repulsive and either long- or moderate short-range attractive interactions. *Computational and Theoretical Chemistry*. 1107, 82-93.
- [8] Mouhamed Moustapha Fall. (2018). Periodic patterns for a model involving short-range and long-range interactions. *Nonlinear Analysis*. 175, 73-107.
- [9] J. Gelhausen, M. Buchhold, A. Rosch and P. Strack. (2016). *SciPost Physics*. Quantum-optical magnets with competing short- and long-range interactions: Rydberg-dressed spin lattice in an optical cavity. 1(1), 1-39.
- [10] M. Blume, (1966). Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 . *Physical Review*. 141(517), 517-524.
- [11] H.W. Capel. (1966). On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*. 32(5), 966-988.

- [12] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, (1995). *Principles of condensed matter physics*, Cambridge Inglaterra, Press Syndicate of the University of Cambridge.
- [13] M. Blume, V. J. Emery, and Robert B. Griffiths. (1971). Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in ^3He - ^4He Mixtures. *Physical Review A*. 4(3), 1071-1077.
- [14] P.V. Santos, F.A. da Costa, J.M. de Araújo. (2018). The random field Blume-Capel model revisited. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 451, 737-740
- [15] Joseph Lajzerowicz and Jean Sivardière. (1975). Spin-1 lattice-gas model. I. Condensation and solidification of a simple fluid. *Physical Review A*. 11(2079).
- [16] Jean Sivardière and Joseph Lajzerowicz. 1975). Spin-1 lattice-gas model. II. Condensation and phase separation in a binary fluid. *Physical Review A*. 11(2090).
- [17] A. N. Berker and Michael Wortis. (1976). Blume-Emery-Griffiths-Potts model in two dimensions: Phase diagram and critical properties from a position-space renormalization group. *Physical Review B*. 14(4946).
- [18] Mustafa Keskin and Cesur Ekiz.(2000). The metastable phase diagram of the Blume–Emery–Griffiths model in addition to the equilibrium phase diagram. *The Journal of Chemical Physics*. 113(13), 5407-5412.
- [19] Alexis Falicov and A. Nihat Berker. (1995). Correlated Random-Chemical-Potential Model for the Phase Transitions of Helium Mixtures in Porous Media. *Physical Review Letters*. 74(3), 426-429.
- [20] Amos Maritan, Marek Cieplak, Michael R. Swift, Flavio Toigo, and Jayanth R. Banavar. (1992). Random-Anisotropy Blume-Emery-Griffiths Model. *Physical Review Letter*. 69(2), 221-224.
- [21] L. Ayache, N. Tahiri, H.Ez-Zahraouy. (2019). Monte Carlo study of a layering transition with spin-1 Blume–Capel model under crystal field effect. *Physica A*. 513, 734-741.
- [22] Octavio D. Rodriguez Salmon, J. Ricardo de Sousa, Minos A. Neto. (2015). Phase diagrams of a spin-1 Ising system with competing short- and long-range interactions. *Physical Review E*. 92(032120), (1-11).
- [23] Octavio D. Rodriguez Salmon, José Ricardo de Sousa, Minos A. Neto, Igor T. Padilha, J. Roberto Viana Azevedo, Francisco Dinóla Neto. (2016). The spin-3/2 Blume–Capel model with competing short- and long-range interactions. *Physica A*. 464, 103-114.
- [24] M. Kardar, *Phys.* (1983). Crossover to equivalent-neighbor multicritical behavior in arbitrary dimensions. *Physical Review B*. 28(1), 244-246.
- [25] John F. Nagle, Ising Chain with Competing Interactions, (1970), *Physical Review A*. 2(5), 2124-2128.

- [26] J. C. Bonner and J. F. Nagle. (1971). Phase Behavior of Models with Competing Interactions. *Journal of Applied Physics*. 42(4), 1280-1282.
- [27] Miron Kaufman and Michael Kahana. (1987). Cayley-tree Ising model with antiferromagnetic nearest-neighbor and ferromagnetic equivalent-neighbor interactions. *Physical Review B*. 37(13), 7638-7642.
- [28] F. Scazza1, C. Hofrichter, M. Höfer, P. C. De Groot, I. Bloch and S. Fölling, (2014). Observation of two-orbital spin-exchange interactions with ultracold SU(N) symmetric fermions. *Nature Physics*. 10, 779-784.
- [29] Octavio D. Rodriguez Salmon, Minos A. Neto, Francisco Dinóla Neto, Denis Américo Murillo Pariona, Justo Rojas Tapia. (2018). Ferromagnetic phases due to competing short- and long-range interactions in the spin -5/2 and spin -2 Blume-Capel model. *Physics Letters A*. 382(46), 3325-3332.
- [30] A. C. Phillips. (2003), *Introduction to Quantum Mechanics*, Manchester, Inglaterra, Department of Physics and Astronomy.
- [31] Wolfgang Nolting, Anupuru Ramakanth, (2009), *Quantum Theory of Magnetism*, London, Inglaterra, Springer.
- [32] Ivan S. Oliveira, Victor L. B. de Jesus, (2011), *Introducción a la Física del Estado Sólido*, Livraria da Física, Rios de Janeiro Brasil.
- [33] J. J. Sakurai, (1994), *Modern Quantum Mechanics*, Los Angeles, Estados Unidos de America, Addison-Wesley Publishing Company.
- [34] K. Huang, (1987), *Statistical Mechanics*, USA New York.
- [35] Gerhard Gompper, Michael Schick, (1994), *Phase Transitions and Phenomena*, Londres Inglaterra.
- [36] Stanley H E, (1971), *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Londres Inglaterra, Oxford University Press.
- [37] E. Ising. (1925). Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*. 31(1) 253-258.
- [38] L. Onsager. (1944). Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model an Order-Disorder Transition, *Physics Review*. 65(3,-4), 117-144.
- [39] S. Jalal, R. Khare and S. Lal, arXiv:1610.09845 [cond-mat.stat-mech].
- [40] R. Peierls. (1936). Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. On Ising's Model of Ferromagnetism. 32, 477-481.
- [41] Landau and Lifshitz, (1980) *Course of Theoretical Physics, Vol. 5, Statistical Physics Part I*, Rusia, Pergamon Press.
- [42] C. Domb, M. S. Green, (1972), *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Londres Inglaterra, Academic Press.

- [43] R. J. Baxter, (1989), *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Londres Inglaterra, Academic Press.
- [44] Fabian Litaiff, J. Ricardo de Sousa, N.S. Branco. (2008). Magnetization plateaux in the antiferromagnetic Ising chain with single-ion anisotropy. *Solid State Communications*. 147, 494-497.
- [45] M. Kaufman. (1989). Equilibrium polimerization on the equivalent-neighbor lattice. *Physical Review B*. 39(10), 6898-6906.
- [46] Robert B. GriKths. (1975). Phase diagrams and higher-order critical points. *Physical Review B*. 12(1), (345-355)
- [47] Majid Vafaei Jahan, Mohammad-R. Akbarzadeh-T. (2012). Hybrid local search algorithm via evolutionary avalanches for spin glass based portfolio selection. *Egyptian Informatics Journal*. 13(2), 65-73.
- [48] Piotr Wałejko, Jarosław Bukowicki, Łukasz Dobrzycki, Paweł Socha, Katarzyna Paradowska. (2019). *Chemical Physics*. 519, 126-136.
- [49] A. León, J. Pozo. (2008). *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 320(3,4), 210-216.
- [50] Károly F. Pál. (1996). The ground state energy of the Edwards-Anderson Ising spin glass with a hybrid genetic algorithm. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 223(3,4), 283-292.
- [51] Emanuel Costabile, J. Roberto Viana, J. Ricardo de Sousa, J.A. Plasca. (2014). The general-spin Blume–Capel model: A study of the multicritical behavior using effective-field theory. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 393, 297-303.